AB SCIEX Séries 6500, équipements

Guide de l'utilisateur du système

Numéro de Document : D5039091 A
Date de diffusion : Juillet 2012

Ce document est fourni aux clients qui ont acheté un équipement AB Sciex à consulter pour le fonctionnement de ces équipements AB Sciex. Ce document est protégé par le droit d'auteur et toute reproduction de tout ou partie en est strictement interdite, à l'exception d'une autorisation écrite de AB SCIEX.

Les logiciels pouvant être décrits dans le présent document sont fournis en vertu d'un accord de licence. Il est interdit de copier, modifier ou distribuer un logiciel sur tout support, sauf dans les cas expressément autorisés dans le contrat de licence. En outre, l'accord de licence peut interdire de séparer un logiciel intégré, d'inverser sa conception, de le décompiler à toutes fins.

Certaines parties de ce document peuvent faire référence à d'autres fabricants et/ou à leurs produits pouvant contenir des pièces avec des noms de marques déposées et/ou de fonctionnement breveté par leurs propriétaires respectifs. Un tel usage est destiné uniquement à désigner les produits des fabricants tels que fournis par AB SCIEX intégrés dans ses équipements et n'autorise pas implicitement l'utilisation ou l'autorisation à d'autres d'utiliser ces noms de produits comme des marques déposées.

AB SCIEX ne garantit pas ni ne représente l'adéquation de ce matériel pour un usage spécifique et n'est pas responsable ou associé à une responsabilité, y compris pour les dommages indirects ou consécutifs, pour toute utilisation d'un acheteur de cet équipement décrit ci-après autre que celle pour laquelle il a été conçu et pour ses conséquences.

Pour utilisation à des fins de recherche uniquement. Ne pas utiliser dans le cadre de procédures de diagnostic.

Les marques déposées dans ce document sont la propriété d'AB SCIEX Pte. Ltd. ou de leurs propriétaires respectifs.

AB SCIEX™ est utilisé sous licence.

AB SCIEX
71 Four Valley Dr., Concord, Ontario, Canada. L4K 4V8.
AB Sciex LP est certifiée ISO 9001.
© 2012 AB SCIEX.
Imprimé au Canada.

Table des Matières

Informations relatives à la sécurité et la réglementation 7
Informations générales de sécurité 7
Symboles et conventions 7
Personnel qualifié 8
Utilisation de l'équipement et modification 8
Étiquettes d'expédition 9
Conformité à la réglementation 9
Australie et Nouvelle-Zélande 9
Canada 9
Europe 10
ÉTATS-UNIS 10
International 10
Symboles et étiquettes sur le spectromètre de masse 10
Symboles sur la santé et la sécurité 12
Produits chimiques 14
Alimentation principale 14
Ventilation Laboratoire 15
Conditions environnementales 15
Système d'élimination (Déchets d'équipements électriques et électroniques) . .16

Chapitre 1 Informations système 17
Principes de fonctionnement 17
Manipulation des données 17
Présentation du système 17
Symboles du panneau 20
Activer le système 20
Pour réinitialiser le système 21
Désactivation du système 21
Configurer le Hardware Profile (profil matériel) pour la pompe à seringue intégrée. 22
Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée). 24
Configurer la pompe à seringue intégrée. 26
Configurer l'électrovanne de dérivation 27
Brancher l'électrovanne de dérivation 28
Brancher l'électrovanne de dérivation en mode Injecteur 28
Brancher l'électrovanne de dérivation en mode dérivation 30
Fluides sécurisés du système 31

Chapitre 2 Profils de matériel et projets 33
Profils de matériel 33
Créer un profil matériel 33
Ajouter des périphériques à un profil matériel 38
Dépannage Activation du profil matériel 39
Créer des projets et des sous-projets 40

Créer un sous-projet 41
Copie d'un sous-projet 42
Dossiers projet installé 42
Sauvegardez le dossier API Instrument 43

Chapitre 3 Réglage de l'instrument et de l'étalonnage. 45

Matériel requis 45
Conditions préalables 45
Optimiser l'instrumentation 45
Vérifier ou régler les performances 46
Récapitulatif des résultats 46

Chapitre 4 Méthodes d'acquisition de base 49

Créer des méthodes d'acquisition 49
Ajouter une expérience 49
Ajouter une période 50
Copier une expérience dans une période 50
Copier une expérience dans une période 50
Techniques de balayage 50
Types de balayage en mode quadripôle 50
Types de balayage en mode LIT 51
Sur l'acquisition de données spectrales 52
Paramètres 53
Icônes Acquisition Method Editor (éditeur des méthodes d'acquisition) 61

Chapitre 5 Lots. 63

Régler les options de file d'attente 63
Créer et soumettre un lot 64
Changer l'ordre de l'échantillon 66
Acquérir les données 67
Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot. 67
Sélectionne Positions Fioles via l'onglet Emplacements 68
Arrêter l'acquisition d'échantillons 70
Conseils pour l'Éditeur de lots et de méthode d'acquisition 70
Menu contextuel de l'Éditeur de lot 71
États de la file d'attente et l'état du périphérique 72
Statut de la file d'attente. 72
Vue Instrumentation et icônes du statut des périphériques 73
Menu contextuel File d'attente 74

Chapitre 6 L'analyse et le traitement de données quantitatives 77

Ouvrir les fichiers de données 77
Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données 77
Affichage de Conditions Expérimentales 78
Afficher les données dans des tableaux 79
Afficher données ADC 80
Afficher données quantitatives de base 81
Chromatogrammes 81
Montrer les TIC d'un spectre 82
Afficher un spectre d'un TIC 82

Générer XIC 83
Générer BPC 85
Générer XWC 86
Afficher données DAD 87
Générer TWC 87
Ajuster le seuil 88
Traitement des données 90
Graphiques 90
Effectuer un zoom avant sur l'axe des y 92
Effectuer un zoom avant sur l'axe des x 92

Chapitre 7 L'analyse et le traitement de données quantitatives 95

Analyse quantitative 95
Méthodes de quantification 95
Sur les tableaux de résultats 96
Méthodes de quantification et tableaux de résultats 96
Créer une méthode avec l'éditeur de méthode de quantification. 96
Créer un tableau de résultats en utilisant Assistant de quantification 97
Créer une requête standard 98
Menu en cliquant sur le bouton droit de la souris de Tableaux de résultats. .100
Réexamen des crêtes et intégration manuelle des crêtes 102
Examen des crêtes 102
Crêtes intégrées manuellement 105
Menu bouton droit Examen de crête 107
Courbes d'étalonnage 108
Affichage des courbes d'étalonnage 108
Courbes d'étalonnage superposées 109
Menu Cliquer sur Courbe d'étalonnage 110
Statistique d'échantillon 111
Afficher les statistiques pour normes et CQ 111
Comparer les résultats entre les lots 112

Appendice A Instrumentation Série 6500 Exigences et paramètres 115

Exigences électriques et en gaz 115
Paramètres de l'instrumentation 115

Appendice B Étalonnage des ions et solutions 121

Appendice C Nettoyage et entretien 125

Précautions en matière de santé et de sécurité 126
Nettoyage de surface 126
Vider la bouteille de trop plein 127
Nettoyage frontaux 127
Meilleures pratiques 129
Préparation pour un nettoyage 129
Nettoyer la plaque rideau. 131
Nettoyer l'avant de la plaque à trou 131
Remettre le système en service 132

Appendice D Dépannage système de base 133

Informations relatives à la sécurité et la réglementation

Ce chapitre contient des informations de sécurité, décrit les symboles et conventions utilisées dans la documentation, et des informations sur la conformité à la réglementation. Il décrit également les dangers et les avertissements associés pour le système, et les précautions qui doivent être prises pour minimiser les risques. En plus de ce chapitre, reportez-vous au *Guide d'aménagement du site* pour les besoins du site, y compris, la source d'alimentation principale, l'évacuation, la ventilation, l'air comprimé, l'azote et la pompe primaire.

Informations générales de sécurité

Avant de faire fonctionner tout système, se familiariser avec son fonctionnement avec les risques potentiels induits. Pour éviter toute blessure ou d'endommager le système, lire, comprendre et respecter toutes les précautions de sécurité. Les avertissements dans ce document et sur les étiquettes du spectromètre de masse sont affichés avec des symboles internationaux. Ne pas tenir compte de ces avertissements peut entraîner des blessures graves.

Les informations de sécurité sont destinées à compléter les règlements fédéraux, locaux ou provinciaux sur l'environnement, la santé et la sécurité (EHS). L'information fournie concerne la sécurité du système au regard du fonctionnement du spectromètre de masse. Il ne couvre pas toutes les procédures de sécurité devant être pratiquées. En fin de compte, vous et votre organisation êtes responsables du respect des règlements EHS fédéraux, locaux ou provinciaux sur le maintien d'un environnement de laboratoire sécurisé.

Pour plus d'informations, reportez-vous à la documentation de référence appropriée du laboratoire et aux procédures d'exploitation standardisées.

Symboles et conventions

Les conventions suivantes sont utilisées tout au long de ce guide.

DANGER ! Danger signifie une action qui conduit à des blessures graves ou la mort.

AVERTISSEMENT !Risque de blessure corporelle. Un avertissement indique une opération qui pourrait causer des blessures si les précautions nécessaires ne sont pas suivies.

AVERTISSEMENT !Risque de choc électrique : Ce symbole avertit d'un risque de choc électrique. Lire l'avertissement et suivre toutes les précautions avant d'effectuer toute opération décrite dans le guide. Ne pas tenir compte de ces avertissements peut entraîner des blessures graves.

AVERTISSEMENT !Risque de brûlure : Ce symbole indique une potentialité de brûlure avec des surfaces chaudes. Lire l'avertissement et suivre toutes les précautions avant d'effectuer toute opération décrite dans le guide. Ne pas tenir compte de ces avertissements peut entraîner des blessures graves.

AVERTISSEMENT !Bio-danger : Ce symbole avertit sur des matériaux biologiquement dangereux. Lire l'avertissement et suivre toutes les précautions avant d'effectuer toute opération décrite dans le guide. Ne pas tenir compte de ces avertissements peut entraîner des blessures graves.

Attention: Une précaution indique une opération qui pourrait endommager le système ou conduire à une de perte de données si elle n'est pas suivie.

Conseil !Fournit une information utile pour mettre en application les techniques et les procédures du texte pour un besoin spécifique et fournit des raccourcis, mais n'est pas indispensable*à* l'achèvement de la procédure.

Remarque : La note souligne une information importante dans une procédure ou une description.

Personnel qualifié

Après l'installation du système, le FSE se servira du *Livret d'utilisation Client* pour former le client au fonctionnement du système, à son nettoyage et sa maintenance basique. Seul le personnel qualifié d'AB SCIEX installera et entretiendra l'équipement. Seul le personnel qualifié par AB SCIEX doit faire fonctionner et entretenir les équipements. Contactez un FSE d'AB SCIEX pour plus d'informations.

Utilisation de l'équipement et modification

Utiliser le système à l'intérieur dans un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le *Guide de l'aménagement du site*. Si le système est utilisé dans un environnement non approprié ou à mauvais escient, tel que recommandé par AB SCIEX, la couverture de l'équipement peut être compromise.

Une modification ou une manipulation du système non autorisée peut être à l'origine de blessures ou de dommages matériels et peut annuler la garantie. Des données erronées peuvent être générées si le système en en fonction avec des conditions environnementales trop stricte ou avec des modifications non autorisées. Contactez un représentant d'AB SCIEX pour plus d'informations sur l'entretien du système.

Étiquettes d'expédition

Tableau 1-1 Étiquettes sur la caisse d'expédition

Étiquettes externe	Définition	Action
 ou . 	TIP N TELL, incident à signaler Des perles bleues dans la flèche indiquent que le conteneur a été renversé ou a fait l'objet d'une mauvaise manipulation.	Porter l'incident sur le connaissement et vérifier l'absence de dommages. Toute réclamation pour un renversement nécessite une note écrite.

Conformité à la réglementation

Ce système est conforme aux normes et règlements figurant dans cette section. Les étiquettes s'y afférant ont été apposées sur le système.

Australie et Nouvelle-Zélande

- **Interférence électromagnétique**—AS/NZ CISPR 11 (classe A)
- **Sécurité**—AS/NZ 61010-1

Canada

- **Interférence électromagnétique**—CAN/CSA CISPR11. Cet appareil ISM est conforme à la norme canadienne ICES-001.

- **Sécurité**—CAN/CSA C22.2 No. 61010-1, et CAN/CSA C22.2 No. 61010-2-061

Europe

- **Compatibilité électromagnétique**—EN 55011 (classe A), EN 61326-1
- **Sécurité**— EN 61010-1, EN 61010-2-061
- **WEEE**— 2002/96/CEE

ÉTATS-UNIS

- **Interférences électromagnétiques, FCC Part 15, Classe A**—Cet équipement a été testé et déclaré conforme aux limites pour un appareil numérique de Classe A, conformément à l'article 15 des règles de la FCC (Federal Communications Commission). Ces limites sont conçues pour fournir une protection raisonnable contre les interférences nuisibles lorsque l'équipement est utilisé dans un environnement commercial. Cet équipement génère, utilise et peut émettre une énergie de fréquence radio et, s'il n'est pas installé et utilisé conformément au manuel de l'opérateur, peut causer des interférences nuisibles aux communications radio. Le fonctionnement de cet équipement dans une zone résidentielle est susceptible de provoquer des interférences nuisibles, auquel cas il vous sera nécessaire de corriger les interférences, à vos frais. Les changements ou modifications non expressément approuvés par le fabricant peuvent annuler votre droit d'utiliser l'équipement.
- **Sécurité—**UL 61010-1, IEC 61010-2-061

International

- **Compatibilité électromagnétique**—IEC 61326-1, IEC CISPR 11 Classe A
- **Sécurité—**UL 61010-1, IEC 61010-2-061

Pour plus d'informations, consultez la déclaration de conformité fournie avec le système.

Symboles et étiquettes sur le spectromètre de masse

Tableau 1-2 Étiquettes sur le spectromètre de masse .

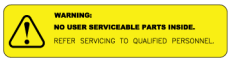
Étiquettes externe	Définition
	**AVERTISSEMENT ! AUCUNE PIÈCE RÉPARABLE PAR L'UTILISATEUR À L'INTÉRIEUR** CONFIER L'ENTRETIEN À UN PERSONNEL QUALIFIÉ.

Tableau 1-2 Étiquettes sur le spectromètre de masse (Suite).

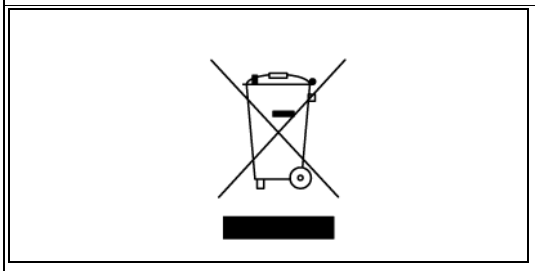
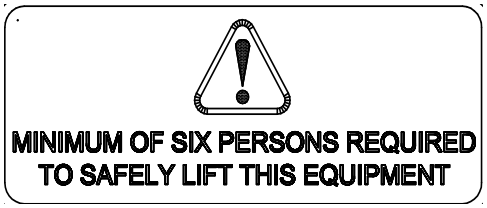
Étiquettes externe	Définition
EN61326–1:2006 CLASS A, GROUP 1, ISM EQUIPMENT.	EN61326—1:2006 Classe A, groupe 1, équipement ISM
This ISM device complies with Canadian ICES-001. Cet appareil ISM est conforme à la norme NMB-001 du Canada.	Cet appareil ISM est conforme à la norme canadienne ICES-001. Cet appareil ISM est conforme à la norme NMB-001 du Canada.
FCC Compliance This device complies with Part 15 of the FCC Rules. Operation is subject to the following two conditions: (1) this device may not cause harmful interference, and (2) this device must accept any interference received, including interference that may cause undesired operation. 0211-3199	Conformité à la réglementation de la FCC. Cet appareil est conforme à la partie 15 des règles de la FCC. Son fonctionnement est soumis aux conditions suivantes : (1) cet appareil ne doit pas provoquer d'interférences nuisibles, et (2) cet appareil doit accepter toute interférence reçue, y compris des interférences pouvant provoquer un fonctionnement indésirable.
	Ne pas jeter des parties de ces équipements comme des déchets municipaux non triés (WEEE).
POUR UTILISATION À DES FINS DE RECHERCHE UNIQUEMENT NE PAS UTILISER DANS DES PROCÉDURES DE DIAGNOSTIQUE.	Ce système est pour une utilisation à des fins de recherche uniquement. Il n'est pas supposé être utilisé pour des procédures de diagnostique.
	Attention, voir documents joints. Au minimum six personnes sont demandées pour soulever en toute sécurité cet équipement.
	AVERTISSEMENT : Risque sur surface chaude.
	Guide de l'opérateur

Tableau 1-2 Étiquettes sur le spectromètre de masse (Suite).

Étiquettes externe	Définition
	Suivre les instructions d'utilisation (obligatoire)
	Courant alternatif
A	Ampères (courant)
	Haute tension. Risque de choc électrique :
	Marche (alimentation secteur)
	Arrêt (alimentation secteur)
	Ligne de terre de sécurité
V	Volts (tension)
V-A	Volts - Ampères (alimentation)
W	Watts (puissance)

Symboles sur la santé et la sécurité

Cette section décrit certains symboles sur la santé et la sécurité présents dans l'environnement du laboratoire.

Tableau 1-3 Symboles des dangers chimiques

Symbole de sécurité	Description
	Bio-danger :
	Risque des produits chimiques caustiques ou corrosifs
	Risque d'explosion

Tableau 1-3 Symboles des dangers chimiques (Suite)

Symbole de sécurité	Description
	Risque chimique comburant
	Danger d'empoisonnement
	Risque de réaction chimique
	Risque de toxicité chimique :

Tableau 1-4 Symboles des dangers mécaniques

Symbole de sécurité	Description
	Danger des machines automatisées
	Danger d'écrasement — venu du haut
	Danger d'écrasement — venu du bas
	Risque d'incendie
	Risque sur surface chaude :
	Risque de radiation au laser
	Risque de levage
	Risque magnétique

Tableau 1-4 Symboles des dangers mécaniques (Suite)

Symbole de sécurité	Description
	Danger de perforation

Tableau 1-5 Symboles d'avertissement des dangers du gaz pressurisé

Symbole de sécurité	Description
	Risque de gaz pressurisé

Produits chimiques

Suivre ces précautions en matière de santé et de sécurité dans le cadre du du travail avec des produits chimiques:

- Examen des fiches de données de sécurité si vous n'êtes pas familiarisé avec les produits chimiques que vous utilisez et précautions en matière de santé et de sécurité qui devraient être suivies.
- Porter une équipement de protection individuelle attribué, y compris des gants sans poudre en nitrile, des lunettes de sécurité, et une blouse de laboratoire.
- Travailler dans un endroit bien aéré.
- Suivre les usages des travaux en électricité en sécurité.
- Éviter les sources d'étincelles lors de l'utilisation de matériaux inflammables, comme l'isopropanol, méthanol, et autres solvants inflammables.
- Éviter tout contact de la peau avec des produits chimiques pendant le nettoyage, et se laver les mains après utilisation.
- Prendre garde à l'utilisation et à l'élimination des produits chimiques et se conformer à toutes les réglementations locales pour éviter tout risque de blessure.

Alimentation principale

AVERTISSEMENT !Risque de choc électrique : Utiliser uniquement du personnel qualifié pour l'installation de toutes les alimentations électriques et les branchements et s'assurer que toutes les installations soient conformes aux règlements locaux.

La puissance de tout le système combiné (spectromètre de masse et pompes primaires) a une consommation de 2,2 kVA (50 or 60 Hz) à 230 V.

Un transformateur de ligne externe n'est pas nécessaire pour le spectromètre de masse, pour le meuble optionnel ou la pompe primaire.

Attention: Ne pas détacher ou brancher tout composant. Le FSE d'AB SCIEX va déballer, connecter et configurer le système à la tension adéquate.

Pour plus d'informations sur les spécifications électriques du système, reportez-vous au *Guide d'aménagement du site*.

Conducteur de protection

L'alimentation principale comprendra une ligne de terre de sécurité correctement installée et vérifiée par un électricien qualifié avant d'y connecter le spectromètre de masse.

Ne pas interrompre intentionnellement interrompre la ligne de terre. Toute interruption de cette ligne est susceptible de rendre l'installation dangereuse.

Ventilation Laboratoire

L'évacuation des fumées et l'élimination des déchets doivent être conformes à toutes les règles fédérales, locales ou régionales sur la santé et la sécurité. Utiliser le système à l'intérieur d'un laboratoire conforme aux conditions environnementales recommandées dans le *Guide de l'aménagement du site*. Le système d'extraction de la source doit être assuré soit par une hotte aspirante externe soit par un système de ventilation externe comme recommandé dans le *Guide d'aménagement site* pour le système.

AVERTISSEMENT !Danger potentiel de produits chimiques toxiques, risque biologique, risque de rayonnement : Ne pas faire fonctionner le spectromètre de masse si le tuyau de drainage d'évacuation de la source n'est pas correctement connecté au système de ventilation du laboratoire.

Conditions environnementales

Utilisation du personnel qualifié pour l'installation des fournitures et accessoires de l'alimentation électrique, du chauffage, de la ventilation et de la plomberie. S'assurer que toutes les installations respectent les lois locales et les règlements sur les risques biologiques. Pour plus d'informations sur les exigences environnementales du système, reportez-vous au *Guide d'aménagement du site,* pour le système.

DANGER ! Risque d'explosion: Ne pas faire fonctionner le système dans un environnement contenant des gaz explosifs. Le système n'est pas conçu pour un fonctionnement dans un environnement explosif.

AVERTISSEMENT !Risque d'asphyxie : Prendre soin d'évacuer les gaz d'échappement correctement. L'utilisation des spectromètres de masse sans ventilation adéquate vers l'extérieur peut constituer un danger pour la santé. En outre, certaines procédures nécessaires pendant le fonctionnement du spectromètre de masse peut entraîner une fuite de gaz dans le courant d'évacuation; dans ces conditions, une ventilation inadéquate peut entraîner de graves blessures.

AVERTISSEMENT !Danger de produits chimiques toxiques, risque biologique, risque de rayonnement : S'assurer que le spectromètre de masse est connecté au système d'évacuation local et canalisé pour contrôler les émissions de gaz dangereux. Le système doit uniquement être utilisée dans un environnement de laboratoire bien ventilé dans le respect des réglementations locales et avec échange d'air approprié pour le travail effectué.

Aux États Unis, OSHA 29 CFR partie 1910-1450 demande quatre à douze changements d'air par heure dans les laboratoires.

AVERTISSEMENT !Bio-danger : Utilisation de matériel biologiquement dangereux, appliquer toujours les réglementations locales d'évaluation des risques, de contrôle et de manipulation. Ce spectromètre de masse ou toute pièce ne sont pas destinés à fonctionner dans un confinement biologique de sécurité.

Système d'élimination (Déchets d'équipements électriques et électroniques)

Ne pas jeter de composants ou d'assemblages , y compris les pièces d'ordinateur, dans des déchetteries municipales. Suivre les ordonnances municipales sur les déchets pour la mise au rebut en vue de réduire l'impact environnemental des DEEE (déchets électriques et matériel électroniques). Pour s'assurer de mettre au rebut cet équipement en toute sécurité, contacter un FSE pour obtenir des instructions.

Clients de l'Union Européenne : Contacter un bureau avec service client d'AB SCIEX Service localement pour un équipement d'enlèvement et de recyclage complémentaire.

Informations système 1

Les série AB SCIEX 6500 sont destinées à l'Analyst qualitative et quantitative d'espèces chimiques. Le système comprend un spectromètre de masse, en option un meuble, une source d'ions, un ordinateur et un logiciel d'Analyst®.

Principes de fonctionnement

Le Spectromètre de masse mesure le rapport masse sur charge des ions pour identifier les composés inconnus, quantifier les composés connus, et fournir des informations sur les structures et propriétés chimiques des molécules.

La série 6500 a une série de filtres quadripôles qui transmettent des ions en fonction de leur valeur masse/charge (m/z). Le premier quadripôle dans cette série est le guide d'ions QJet™ situé entre la plaque d'orifice et la zone Q0. Le guide d'ions QJet ne filtre pas les ions, mais les concentre avant qu'ils n'entrent dans la zone Q0. En préconcentrant le flux des ions les plus grands par l'orifice le plus large, le guide d'ions QJet augmente la sensibilité de l'instrumentation et améliore le rapport signal-sur-bruit. Dans la zone Q0, les ions sont encore concentrés avant de passer dans le quadripôle Q1.

Le quadripôle Q1 est un quadripôle filtrant qui trie les ions avant qu'ils n'entrent dans la cellule de collision Q2. La cellule de collision est là où l'énergie interne des ions est augmenté avec les collisions par molécules de gaz jusqu'à ce que la cassure moléculaire crée une production d'ions. Cette technique permet aux utilisateurs de concevoir des expériences qui mesure m/z de ions produits pour déterminer la composition des ions parents.

Après le passage par la cellule de collision Q2, les ions entrent dans le quadripôle Q3 pour un filtrage supplémentaire, puis entrent dans le détecteur. Dans le détecteur, les ions créent un courant qui se converti en une impulsion de tension. Les impulsions de tension quittant le détecteur sont directement proportionnelles à la quantité d'ions entrant dans le détecteur. Le système surveille ces impulsions de tension et convertit les informations en un signal. Le signal représente l'intensité de l'ion pour une valeur spécifique de m/z et le système affiche cette formation sous forme de spectre de masse.

Manipulation des données

Le logiciel d'Analyst requiert un ordinateur sous système d'exploitation Windows. L'ordinateur avec le logiciel du système associé fonctionne avec le contrôleur système et le micrologiciel correspondant pour contrôler l'instrumentation et l'acquisition de données. Pendant le fonctionnement du système, les données acquises sont envoyées au logiciel d'Analyst pour être affichées en spectre de masse complet ou en intensité des ions multiples ou simples en face de la variable temps ou en courant d'ion total face à la variable temps.

Présentation du système

Figure 1-1Montre un système avec une pompe à seringue, une source d'ions, une électrovanne de dérivation et un écran de surveillance de la source d'ions Nanospray®.en option

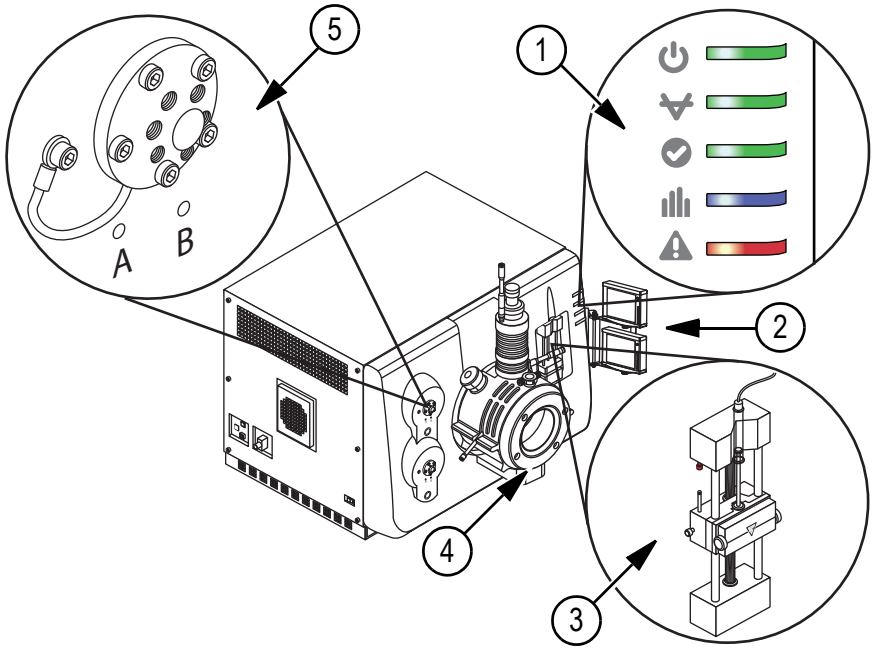


Figure 1-1 Vue avant

Article	Description	Pour plus d'informations, reportez-vous à la section ...
1	Symboles du panneau	Tableau 1-1 à la page 20.
2	Écran de surveillance de la source d'ions Nanospray (en option)	*Guide de l'utilisateur de la source d'ions NanoSpray®disponible* dans le menu d'aide du logiciel d'Analyst ou sur le site d'AB SCIEX www.absciex.com.
3	Pompe à seringue	Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée). à la page 24.
4	Source d'ions	*Guide de l'utilisateur de la source d'ions IonDrive™ Turbo V* dans le menu d'aide du logiciel d'Analyst ou sur le site d'AB SCIEX www.absciex.com.
5	Électrovanne de dérivation	Si la source d'ions en option DuoSpray™ est installée, alors électrovanne de dérivation est remplacée par la soupape DuoSpray. L'électrovanne de dérivation est installée sous la soupape DuoSpray. Reportez-vous à Configurer la pompe à seringue intégrée. à la page 26. Pour plus d'informations sur la source d'ions DuoSpray, reportez-vous au guide de l'opérateur de la source d'ions *DuoSpray™* disponible dans le menu d'aide du logiciel d'analys ou sur le site d'AB SCIEX www.absciex.com.

Figure 1-2 Indique l'emplacement des connexions du système, y compris l'emplacement du bouton de réinitialisation, de la ventilation et des interrupteurs de l'instrumentation.

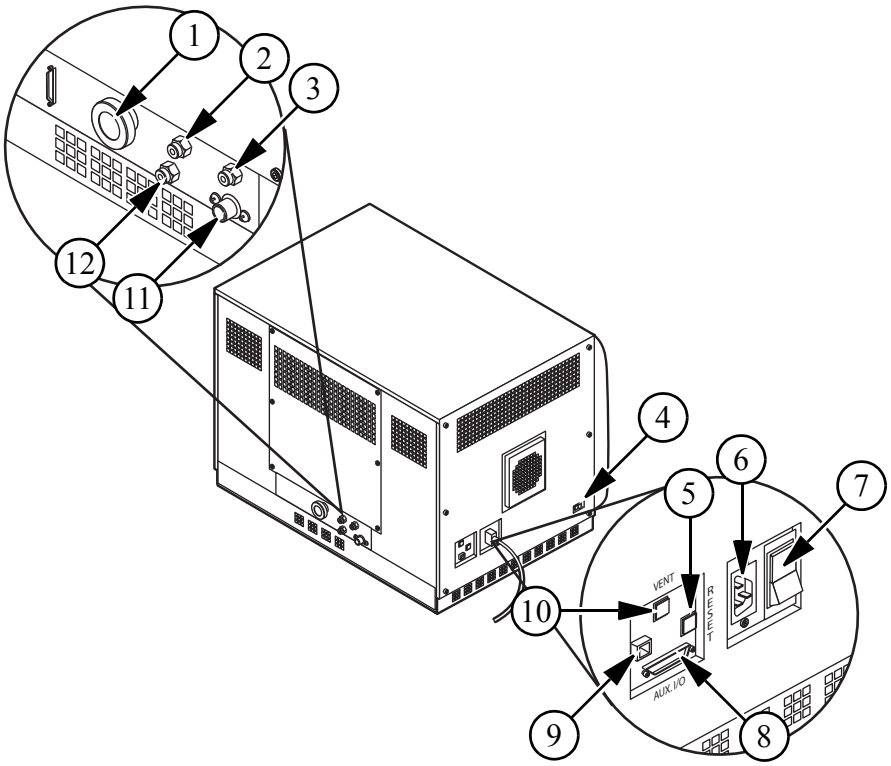


Figure 1-2 Vues arrière et de côté

Article	Description	Pour plus d'informations ...
1	Connexion de la dépression de la pompe primaire	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX
2	Alimentation de gaz d'azote (alimentation Curtain Gas™, gaz CAD)	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX
3	Fourniture de l'évacuation de la source:	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX
4	Connexion de la communication de la source	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX
5	Bouton de réinitialisation l'instrumentation	Reportez-vous à Pour réinitialiser le système à la page 21.
6	Connexion de l'alimentation principale	Reportez-vous à Activer le système à la page 20 ou Désactivation du système à la page 21.
7	Contacteur de l'instrumentation (en haut = Marche; en bas = Arrêt)	Reportez-vous à Activer le système à la page 20 ou Désactivation du système à la page 21.
8	Connexion auxiliaire I/O	Reportez-vous au *Guide d'installation des périphériques*.
9	Connexion Ethernet (connecte l'instrumentation et l'ordinateur)	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX

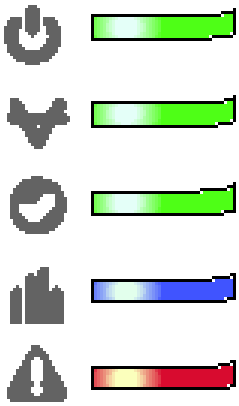
Figure 1-2 Vues arrière et de côté (Suite)

Article	Description	Pour plus d'informations ...
10	Bouton pour la ventilation de l'instrumentation (arrêt)	Reportez-vous à Activer le système à la page 20 ou Désactivation du système à la page 21.
11	déchets de l'évacuation de la source (bouteille de trop plein)	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX
12	Alimentation en air (Gaz1/Gaz2)	Contactez un technicien (FSE) d'AB SCIEX

Symboles du panneau

Tableau 1-1Montre les écrans des statuts.

Tableau 1-1 Symboles du panneau

Écrans du panneau	Couleur	Nom	Description
	Vert	Puissance	Allumé lorsque le système est sous tension.
	Vert	Dépression	Allumé lorsque la dépression correcte a été atteinte; et clignote si elle n'aspire pas correctement (pendant le tirage et la ventilation).
	Vert	Prêt	Allumé lorsque le système est sur PRÊT. Le système doit être sur Prêt pour fonctionner.
	Bleu	Balayage	Clignote quand le système acquiert des données.
	Rouge	Défaut	Allumé lorsque le système détecte une défaillance du système.

Après la mise sous tension du système, tous les cinq voyants s'allument. Le voyant d'alimentation reste allumé. Les quatre autres voyants clignotent pendant deux secondes, puis s'éteignent. Le voyant de l'aspiration commence à clignoter. Après avoir atteint le niveau d'aspiration suffisant, ce voyant reste allumé.

Activer le système

AVERTISSEMENT !Risque de blessure corporelle. Risque de blessure et de dommage sur le système. Si le système doit être déplacé, contactez un technicien.

Remarque : Avant d'utiliser le système, lisez Informations relatives à la sécurité et la réglementation à la page 7

Avant de mettre le système sous tension, assurez-vous que les exigences spécifiées dans le *Guide d'aménagement du site* soient remplies. Ce guide comprend des informations sur l'alimentation et les connexions, l'évacuation de la source, l'air comprimé, l'azote, les pompes primaires, la ventilation, l'extraction et le nettoyage du site.

1. Assurez-vous qu'il y a un accès facile au cordon d'alimentation. Le cordon d'alimentation doit être accessible pour débrancher le spectromètre de masse de l'alimentation secteur.
2. S'assurer que la bouteille de 4 L de vidange soit branchée à la connexion de la ligne d'évacuation des déchets à l'arrière du spectromètre de masse.
3. S'assurer que le câble d'alimentation secteur est branché au spectromètre de masse.
4. Assurez-vous que le câble d'alimentation du spectromètre de masse et de la pompe primaire soit branché sur l'alimentation en 200 V à 240 V.
5. S'assurer que le câble Ethernet est connecté à la fois au spectromètre de masse et à l'ordinateur.
6. Appuyer sur le bouton Marche du spectromètre de masse.

   Remarque : Si l'interrupteur est déjà sur Marche, arrêter et remettre sur Marche.

   Le spectromètre de masse se met en marche puis la pompe primaire démarre après 30 secondes.
7. Allumer l'ordinateur s'il a été désactivé.
8. Démarrer le logiciel d'Analyst®.
9. Cliquer sur Afficher > **échantillon file d'attente** , puis cliquer sur l'icône Prêt.

Pour réinitialiser le système

- Appuyer, en le maintenant enfoncé, **sur le bouton** de réinitialisation pendant 5 secondes.

  Un déclic se fait entendre lorsque le relais est activé. Après environ trois minutes, le spectromètre de masse doit atteindre sa pression de fonctionnement.

Désactivation du système

1. Finir toute opération de balayage en cours ou cliquez sur **Acquérir > abandonner échantillonnage**. Reportez-vous à Arrêter l'acquisition d'échantillons à la page 70.

   Attention: Dommage potentiel sur l'équipement : Arrêter le débit de l'échantillon avant d'arrêter le spectromètre de masse.
2. Arrêter le débit de l'échantillon vers le spectromètre de masse.
3. Dans le logiciel d'Analyst, désactiver le profil matériel, s'il est actif, fermer le logiciel d'application, puis arrêter la demande d'exécution de l'Analyst.

Attention: Dommage potentiel sur l'équipement : Si le spectromètre de masse doit être arrêté pour un certain temps, évacuer la chambre à vide pour empêcher tout échappement de la pompe primaire d'être réaspiré dans la chambre à vide.

4. Appuyez en le maintenant **enfoncé** sur le bouton de ventilation pendant 1 secondes.

   La turbo-pompe ralentira progressivement. Les pompes primaires sont contrôlées par le système et continueront de fonctionner pendant environ 15 minutes.
5. Attendre 15 minutes, puis éteignez le spectromètre de masse.
6. Débrancher le câble d'alimentation secteur de la cloison sur le côté gauche du spectromètre de masse.
7. Débrancher le câble d'alimentation de chaque pompe primaire du secteur.

Configurer le Hardware Profile (profil matériel) pour la pompe à seringue intégrée.

S'assurer que la pompe à seringue est positionnée correctement pour éviter d'endommager la seringue. Pour plus d'informations sur la création et l'édition des profils matériel, reportez-vous à Créer un profil matériel à la page 33

1. Dans la barre de navigation, sous **Configure (Configurer)**, double-cliquer sur **Hardware Configuration (Configuration Matériel)**.
2. Créer ou modifier le profil matériel contenant le spectromètre de masse.
3. Dans les périphériques dans **la boîte de dialogue Profil,** sélectionner le spectromètre de masse et cliquer **Setup Device (Config. périphérique).**
4. Dans l'onglet **Configuration,** sélectionner (Figure 1-3), Utiliser **une pompe à seringue intégrée**.
5. Cliquer sur **OK**.

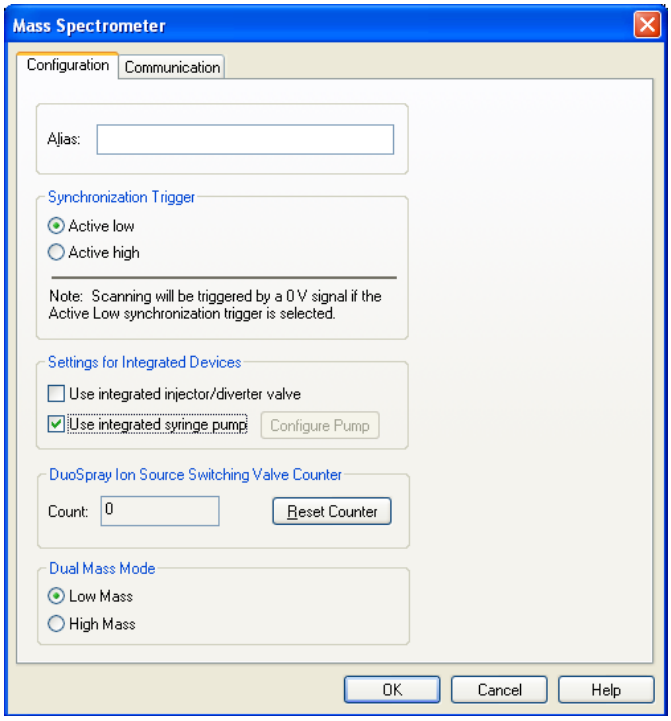


Figure 1-3 Onglet Configuration

6. Activer le profil matériel.

Ajuster la Integrated Syringe Pump Position (position de la pompe à seringue intégrée).

1. Appuyer sur **Déverrouillage**sur le côté droit de la pompe à seringue pour abaisser la base et insérer la seringue comme illustré à . Figure 1-4

   S'assurer que l'extrémité de la seringue affleure la base et que l'axe de la seringue reste dans l'encoche.

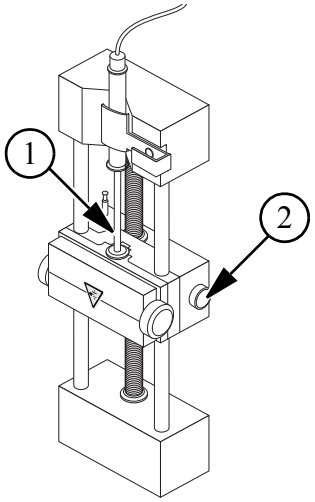


Figure 1-4 Descente de la seringue

Article	Description
1	Le piston de la seringue.
2	Relâcher le bouton. Appuyer pour augmenter ou abaisser le niveau de la base.

2. Régler la tringle (Figure 1-5) de façon à ce qu'elle déclenche l'arrêt automatique de la seringue avant que le piston n'arrive au fond de la seringue en verre.

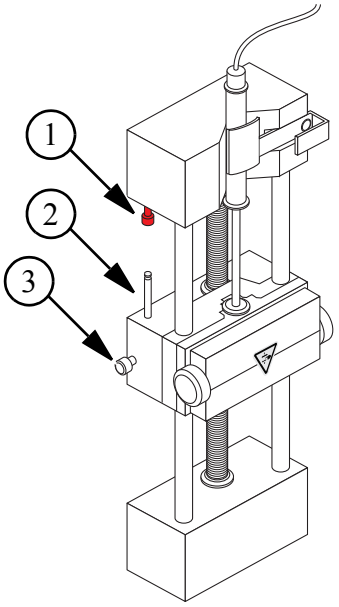


Figure 1-5 Butée de sécurité

Article	Description
1	Arrêt automatique de la seringue Après que la tringle bute sur l'arrêt automatique de la seringue, la pompe à seringue s'arrête.
2	Tringle Régler la hauteur pour empêcher le piston de la seringue de heurter la seringue lors de l'introduction de l'échantillon.
3	Vis de blocage de la tringle Serrer la vis après que la hauteur de la tringle ait été réglée.

3. Tourner les vis latérales comme illustré pour assurer Figure 1-6la seringue.

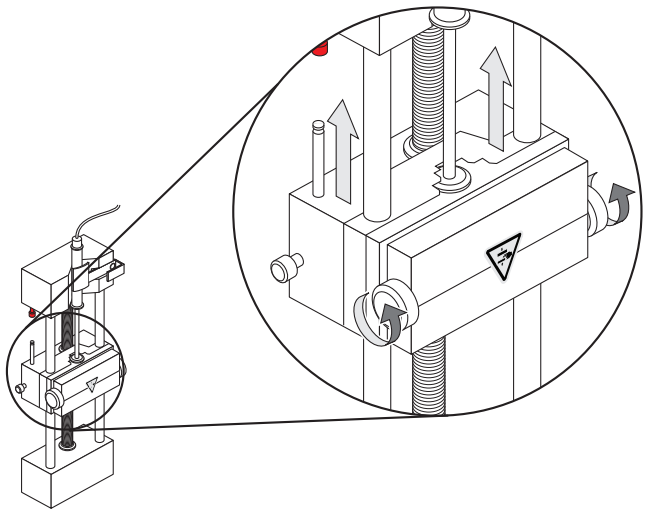


Figure 1-6 Pompe à seringue

4. Sur le spectromètre de masse, appuyer sur le bouton sur le côté droit de la pompe à seringue ( ) pour lancerFigure 1-7 le flux.

   Le témoin vert près du bouton s'allume lorsque la pompe à seringue est en cours d'utilisation.

Conseil !La pompe à seringue peut également être démarrée avec le logiciel d'Analyst en mode de réglage manuel.

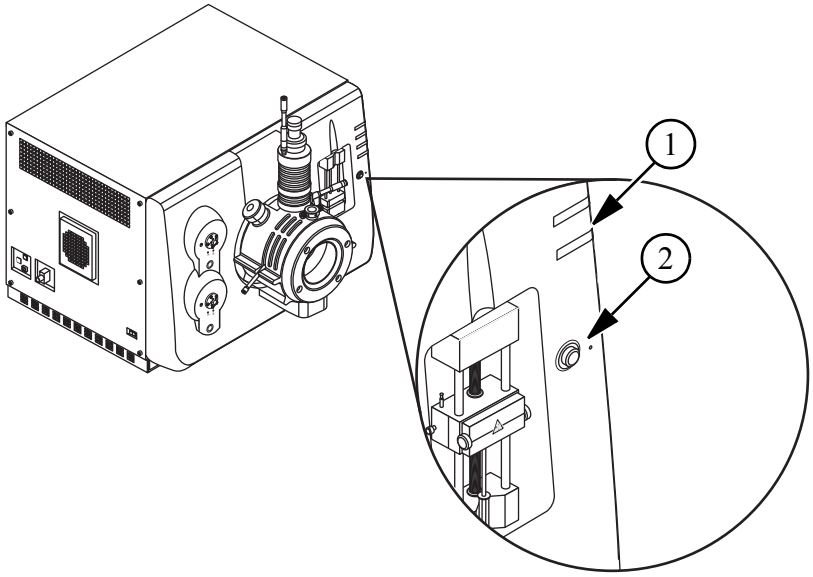


Figure 1-7 Écran de pompe à seringue

Article	Description
1	Écran du statut de la pompe à seringue
2	Bouton marche/arrêt de la pompe à seringue

Configurer la pompe à seringue intégrée.

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire (Acquérir)**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method (Construire une méthode d'acquisition)**.
2. Dans le **panneau Acquisition Method (Méthode d'acquisition),** cliquer sur l'icône Masse Spec.

   L'onglet des propriétés de la méthode par la pompe à seringue s'o0uvre dans l'éditeur de la Acquistion Method Editor (méthode d'acquisition).
3. Dans le champ**Diamètre de la seringue (mm)** , taper son diamètre.
4. Dans le champ**Flow Rate(Débit)**, entrer le débit.
5. Dans la liste **Unit (Unité)**, sélectionner les unités de débit.
6. Enregistrer le fichier.

Configurer l'électrovanne de dérivation

La soupape de diversion a deux positions, 6 ports pour valve. Si la vanne est en position A (Figure 1-9), l'échantillon passe par la boucle externe. Lorsque la valve est mis en position B (Figure 1-10), l'échantillon est injecté. Pour plus d'informations sur la création et l'édition des profils matériel, reportez-vous à Créer un profil matériel à la page 33.

1. Dans la barre de navigation, sous **Configure (Configurer)**, double-cliquer sur **Hardware Configuration (Configuration Matériel)**.
2. Créer ou modifier le profil matériel contenant le spectromètre de masse.
3. Dans **l'onglet** Configuration (Figure 1-8), sélectionner **Utiliser un injecteur intégré ou une valve de dérivation**.
4. Cliquer sur **OK**.

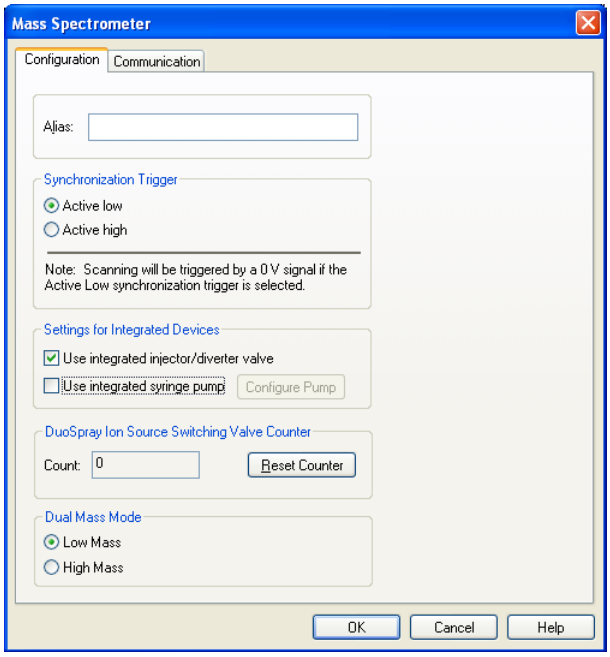


Figure 1-8 Onglet Configuration

5. Activer le profil matériel.

Brancher l'électrovanne de dérivation

La vanne de dérivation doit être installée pour les deux injecteurs et les divers modes de dérivation.

Brancher l'électrovanne de dérivation en mode Injecteur

La soupape de diversion a deux positions, 6 ports pour valve. En mettant la vanne en position A (Figure 1-9), l'échantillon passe par la boucle externe. En mettant la valve mis en position B (Figure 1-10), l'échantillon est injecté.

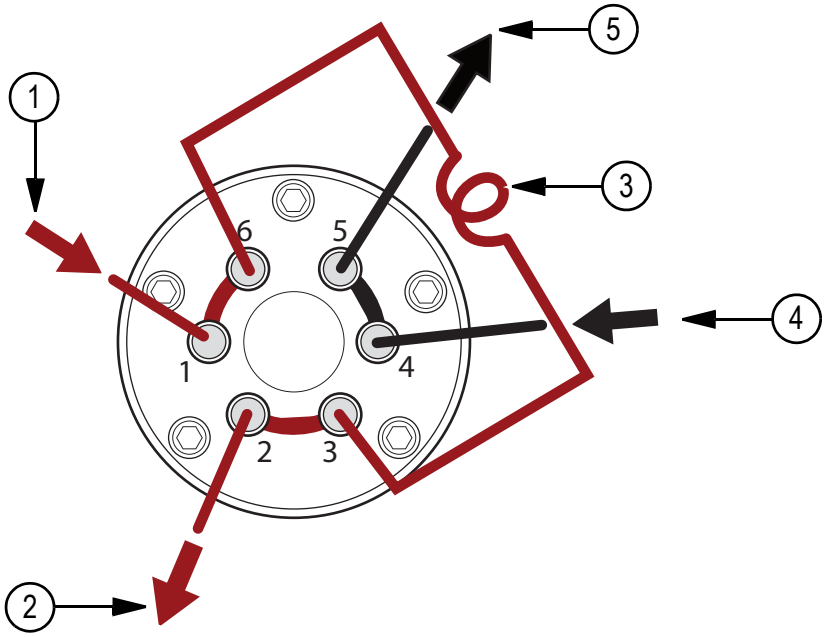


Figure 1-9 Électrovanne de dérivation--- mode injecteur en position A

Article	Description
1	Échantillon mis
2	Déchets éjectés
3	Boucle de l'échantillon
4	Phase de mobilité mise
5	Vers la colonne

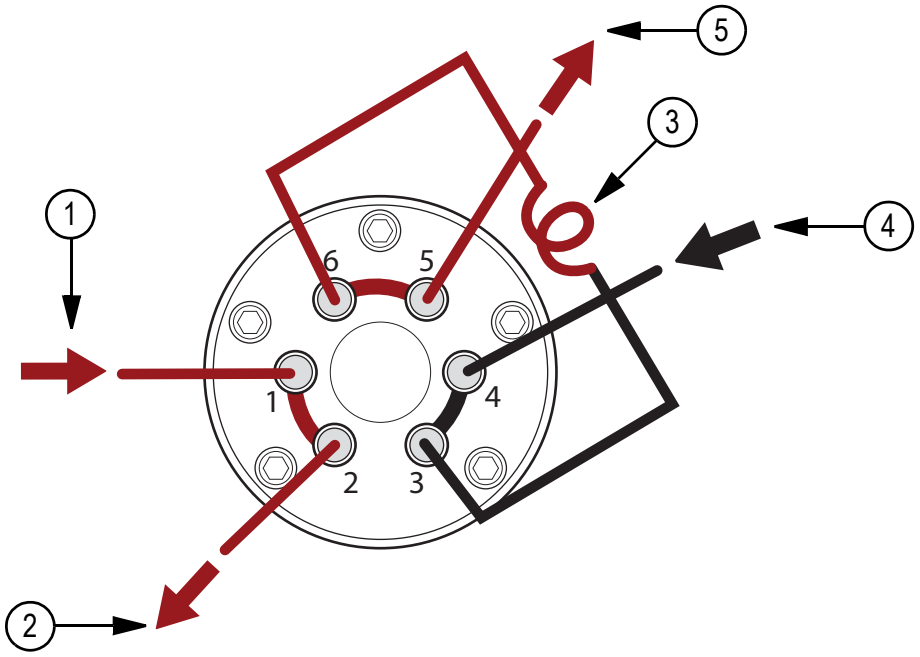


Figure 1-10 Électrovanne de dérivation--- mode injecteur en position B

Article	Échantillon mis
1	Échantillon mis
2	Déchets éjectés
3	Boucle de l'échantillon
4	Phase de mobilité mise
5	Vers la colonne

Brancher l'électrovanne de dérivation en mode dérivation

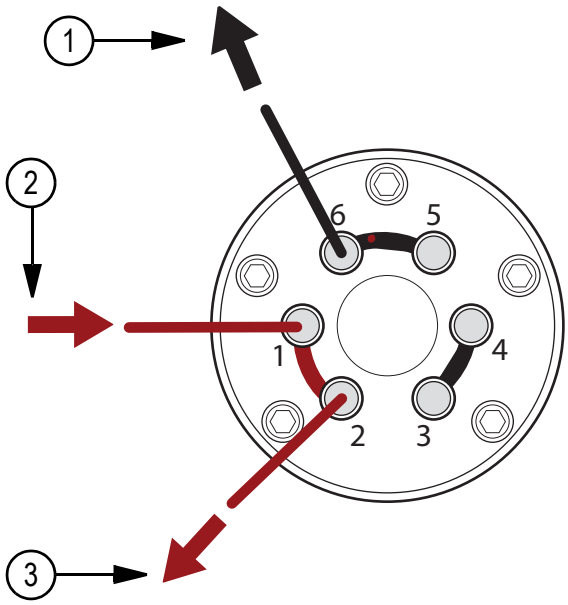


Figure 1-11 Électrovanne de dérivation--- mode dérivation en position A

Article	Description
1	Vers le spectromètre de masse.
2	Depuis la colonne
3	Déchets éjectés

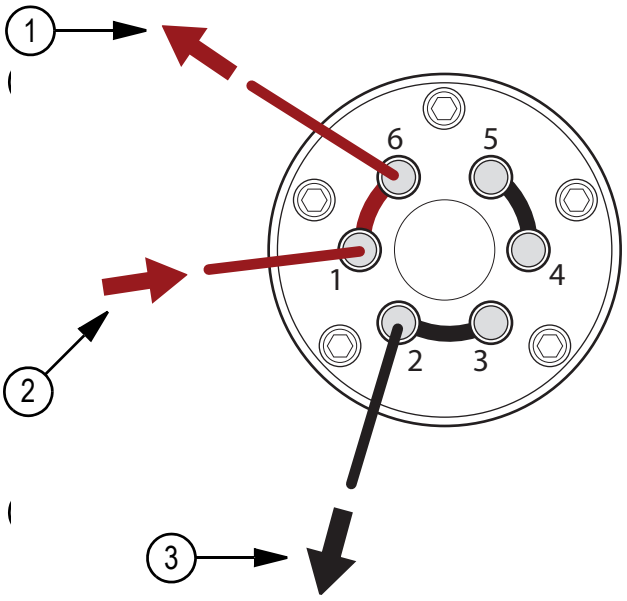


Figure 1-12 Électrovanne de dérivation--- mode dérivation en position B

Article	Échantillon mis
1	Vers le spectromètre de masse.
2	Depuis la colonne
3	Déchets éjectés

Fluides sécurisés du système

Les liquides suivants peuvent être utilisés en toute sécurité avec le système :

- LC/MS qualité de méthanol (0 à 100%).
- LC/MS qualité d'acétonitrile (0 à 100%).
- HP-LC qualité de l'eau
- LC/MS qualité de l'acide formique (0 à 1%).
- Acétate d'Ammonium (0 à 1%)

Remarque : Cette liste n'est pas complète. Ne pas utiliser d'autre liquide sans confirmation reçue d'AB SCIEX de sa nature inoffensive.

Profils de matériel

Un profil matériel indique au logiciel quelles instrumentations et périphériques est à utiliser et comment ils sont configurés et connectés à l'ordinateur.

Chaque profil matériel doit inclure un spectromètre de masse. Avant de créer une méthode d'acquisition, assurez-vous que tous les périphériques utilisés dans la méthode sont inclus dans le profil matériel. Dans les options de configuration pour le spectromètre de masse, s'assurer que la pompe à seringue est activée si elle doit être utilisée au cours de l'acquisition.

Les périphériques configurés dans le profil matériel actif et sélectionnée dans la boite de dialogue Méthode Ajout ou Retirer Périphérique apparaissent sous forme d'icônes dans le volet de navigation Méthode d'acquisition. Seuls les périphériques inclus dans le profil matériel peuvent être utilisés pour créer des méthodes d'acquisition.

Pour plus d'informations sur la configuration des périphériques, reportez-vous *au guide d'installation des périphériques.* Pour obtenir la liste des périphériques pris en charge, reportez-vous au *Guide d'installation* du logiciel pour l'Analyst®.

Créer un profil matériel

L'utilisateur peut créer plusieurs profils de matériel, mais seul un profil peut être actif à tout moment. Dans le profil matériel, les utilisateurs peuvent spécifier la gamme de masse dans laquelle l'instrumentation série 6500 doit fonctionner.

1. Dans la barre de navigation, sous **Configurer**, double-cliquer sur **Configuration Matériel**.

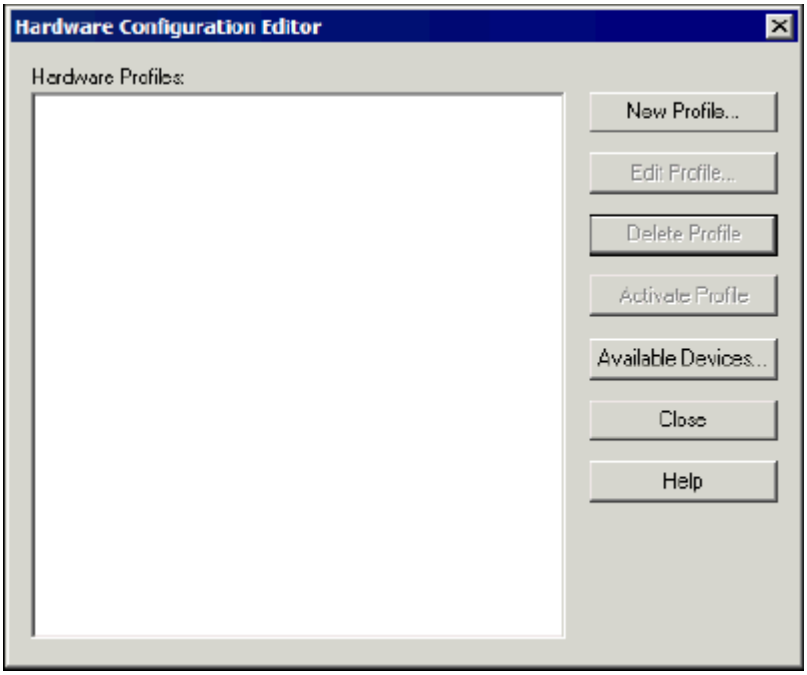


Figure 2-1 Boite de dialogue Éditeur de configuration du matériel

2. Dans **Hardware Configuratio Editor** (Éditeur de configuration du matériel), cliquer sur **New Profile (Nouveau profil)**.

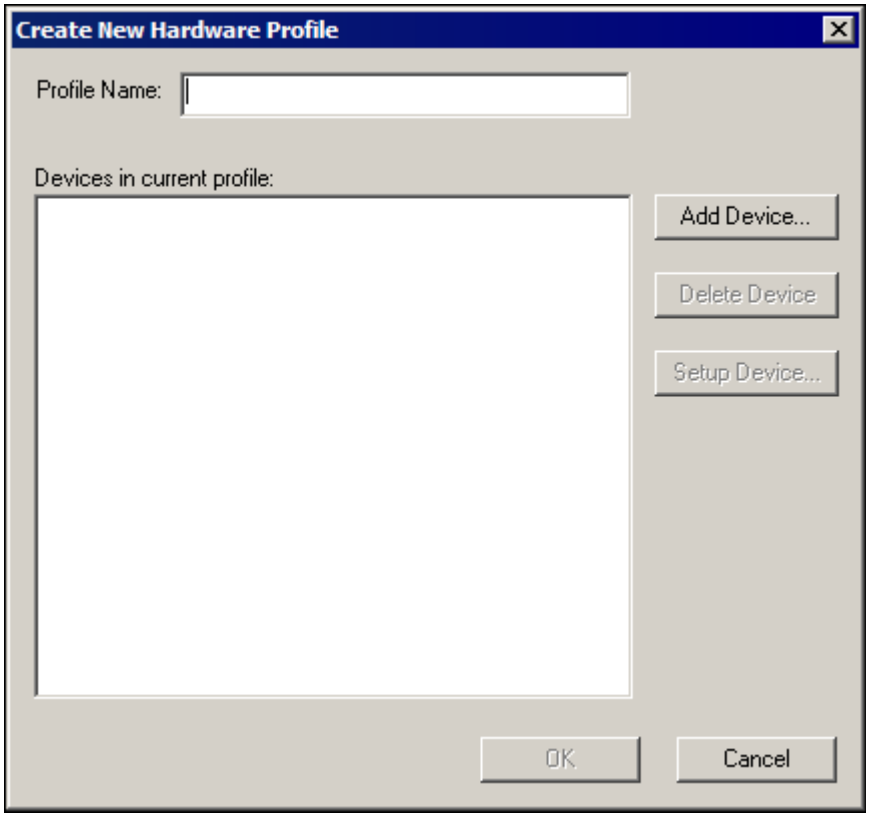


Figure 2-2 Créer un nouveau profil matériel

3. Dans **Profile Name (Nom de profil)**, taper un nom.
4. Cliquer sur **Add Device (Ajouter périphériques)**.

   Dans la boite de dialogue Périphériques disponibles, dans le champ Device Type (Type de périphérique), Spectromètre de masse est la valeur prédéfinie.

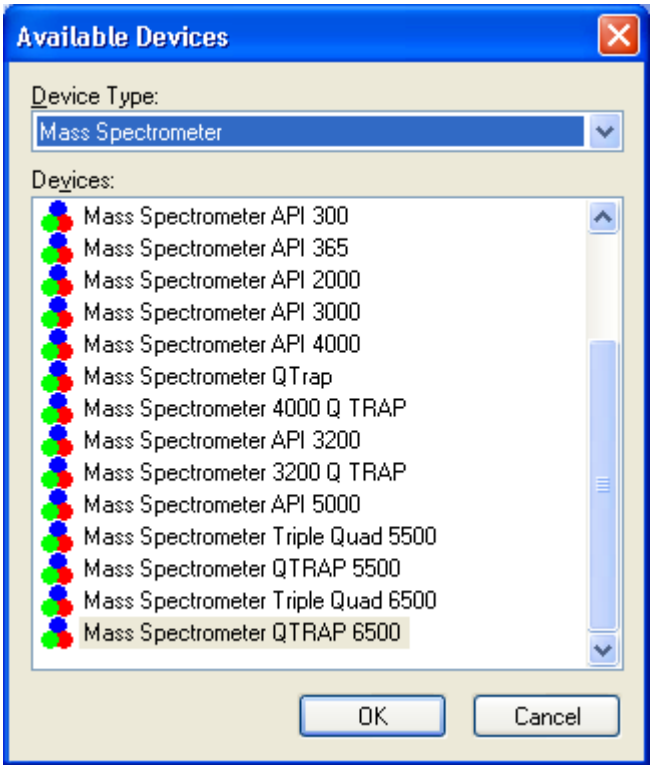
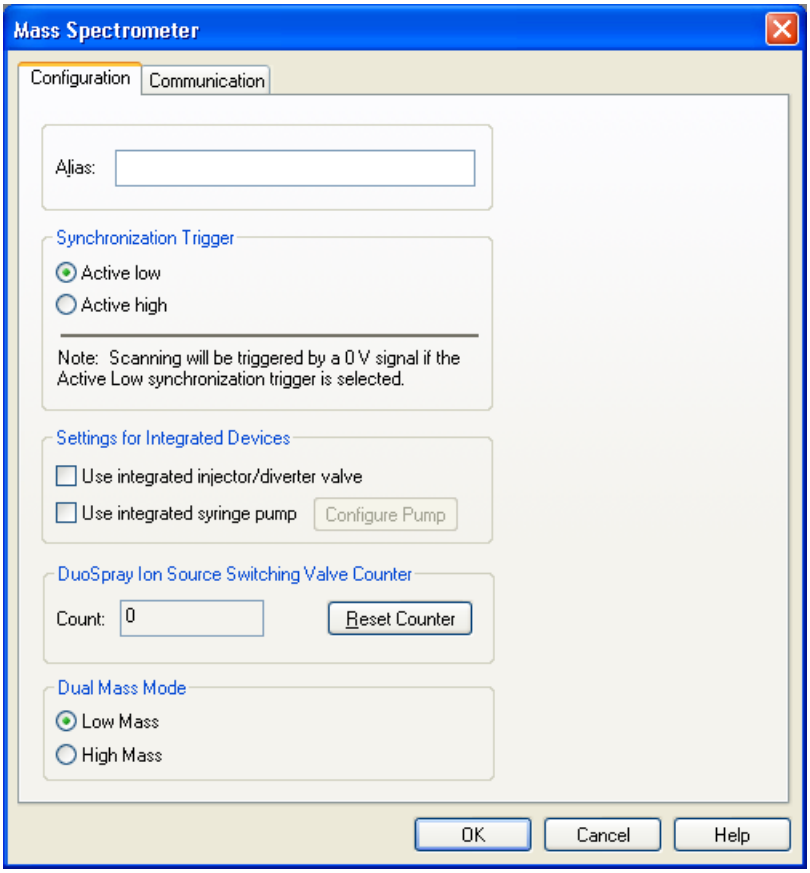


Figure 2-3 Boite de dialogue Périphériques disponibles

5. Dans **Devices (Périphériques),** sélectionner l'instrumentation
6. Cliquer sur **OK**.
7. Dans **Devices in current profile (Profil périphériques en usage),** sélectionner l'instrumentation
8. Cliquer sur **Setup Devices (Régler périphériques)**.

   La boite de dialogue du spectomètre de masse s'ouvre.



9. Dans **Configuration**dans la **section Dual mass Mode (Mode double masse)**, sélectionner l'une des deux options suivantes :
    - **Faible masse** : pour travailler en gamme de masse limitée, en haute sensibilité d'exploitation, sélectionner cette option. La gamme de masse est de 5 à 1000 Da pour un balayage LIT (piège à ions linéaire) et 50 à 1250 Da pour le balayage par quadripôle.
    - **Masse élevée** : pour travailler en plage de masse étendue, sélectionner cette option.La gamme de masse est de 5 à 2000 Da pour un balayage LIT et 50 à 2000 Da pour un balayage par quadripôle.
10. Sélectionner les autres options de **Configuration** et **Communication** comme demandé.
11. Cliquez sur **OK** pour revenir à **Création d'un nouveau profil matériel**.
12. Cliquer sur **Ajouter périphériques.**
13. Ajouter et configurer chaque périphérique utilisé avec l'instrumentation. Reportez-vous à Ajouter des périphériques à un profil matériel à la page 38.
14. Dans **Create New Hardware Profile (Créer un nouveau profil matériel)**, cliquer sur **OK**.
15. Dans **Hardware Configuration Editor (Éditeur de configuration du matériel)**, cliquer sur profil matériel.
16. Cliquer sur**Activate Profile (Activer le profil)**.

La case devient verte. Si un x rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil matériel. Reportez-vous à Dépannage Activation du profil matériel.

Conseil !Un profil matériel n'a pas à être désactivé avant d'en activer un autre. Cliquer sur un profil matériel, puis cliquer sur**Activate Profile(Activer le profil)**. L'autre profil est automatiquement désactivé.

17. Cliquer sur **Close(Fermer)**.

Ajouter des périphériques à un profil matériel

Les périphériques doivent être configurés de façon autoriser le logiciel à communiquer avec eux.

Lorsque le logiciel est installé, le pilote requis pour chaque périphérique est également installé. Une fois que les appareils sont connectés physiquement à l'ordinateur, configurer le périphérique.

1. Ouvrir Éditeur de configuration du matériel.
2. Dans **Hardware Profiles (Profil matériel)**, désactiver le profil matériel.
3. Cliquer sur**Edit Profile (Éditer profil)**.
4. Cliquer sur **Add Device (Ajouter périphériques)**.
5. Dans **Available Devices (Périphériques disponibles)**, dans **Device Type (Type de périphérique)**, sélectionner le périphérique.
6. Cliquer sur **OK**.

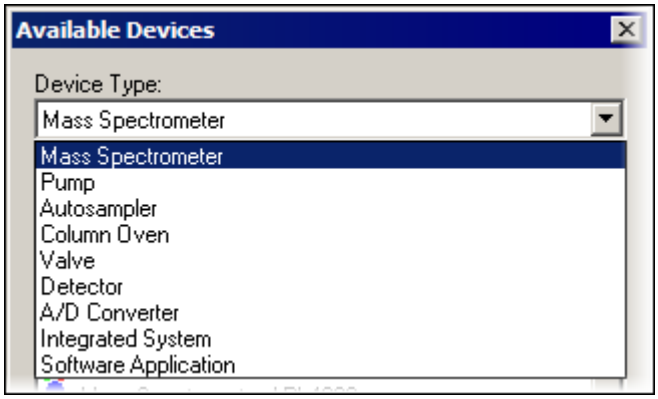


Figure 2-4 Boite de dialogue Périphériques disponibles

7. Dans **Devices in current profile (Profil périphériques)** en usage, sélectionner le périphérique.
8. Cliquer sur **Setup Devices (Régler périphériques)**.

   Une boîte de dialogue contenant les valeurs de configuration de périphérique s'ouvre.
9. Dans **Communication**, dans **Alias**, taper un nom ou un autre identificateur. (En option)

Remarque : Pour les périphériques utilisant une communication sérielle, s'assurer que le port série sélectionné correspond au port série auquel le périphérique est connecté physiquement. Si un câble d'extension sériel est utilisé, alors le numéro sélectionné dans le profil est le nombre sur le câble plus deux.

Remarque : Le champ Alias peut aussi être appelé boite du Nom et peut être trouvé sur un autre onglet sous Alias.

- Si le périphérique utilise un port série comme interface de communication, dans le numéro de port COM, sélectionner le port COM auquel le périphérique est connecté.
- Si le périphérique utilise Ethernet comme une interface de communication, saisir l'adresse IP attribuée au périphérique par l'administrateur ou utiliser le nom d'hôte correspondant à l'adresse.
- Si le périphérique utilise une carte GPIB comme une interface de communication, ne pas modifier les paramètres de la carte GPIB.

Le reste des valeurs prédéfinies pour le périphérique sont probablement approprié; ne pas les changer. Pour plus d'informations sur Configuration et Communication, reportez-vous à l'aide.

10. Pour restaurer les valeurs prédéfinies des périphériques, dans **Communication**, cliquer sur **Définir valeurs par défaut**.
11. Pour enregistrer les modifications, cliquez sur **OK (Accepter)**.
12. Répétez les étapes 4 à 9 pour chaque périphérique.
13. Dans **Create New Hardware Profile (Créer un nouveau profil matériel)**, cliquer sur **OK**.
14. Pour activer le profil matériel, dans l'**éditeur de configuration Matériel**, cliquez sur le profil matériel.
15. Cliquer sur **Activer le profil**.

    La case devient verte. Si un x rouge s'affiche, alors il y a un problème avec l'activation du profil matériel. Reportez-vous à Dépannage Activation du profil matériel.

Conseil !Un profil matériel n'a pas à être désactivé avant d'en activer un autre. Cliquer sur un profil matériel, puis cliquer sur **Activate Profile(Activer le profil)**. L'autre profil est automatiquement désactivé.

16. Cliquer sur **Close(Fermer)**.

Dépannage Activation du profil matériel

Si un profil matériel ne peut devenir actif, une boîte de dialogue s'affiche, indiquant que le périphérique de profil a échoué. Un tel profil peut être défectueux en raison d'une erreur de communication.

1. Lire le message d'erreur correspondant. Selon le type de message, il y a peut-être un problème avec un périphérique ou comment la communication est mise en place.
2. Vérifier que le périphérique est sous tension et actif.
3. Vérifiez que le port COM affecté au périphérique est correct.

Conseil !Sur les ordinateurs équipés de deux ports série intégrés, le premier port de la carte d'extension de port série est généralement COM3, même si le câble indique P1.

4. Vérifier que les paramètres de communication avec le périphérique (par exemple, réglages du micro-interrupteur) sont correctement définis et **correspondent aux paramètres de l'onglet Communication**.
5. Mettre le périphérique hors tension.
6. Attendre 10 Secondes
7. Mettre le périphérique sous tension.

   Patientez jusqu'à ce que tous les périphériques soient mis sous tension avant d'essayer d'activer le nouveau profil matériel. Certains périphériques demandent 30 secondes ou plus pour compléter l'opération de la mise sous tension.
8. Activer le profil matériel.
9. Si le problème persiste, supprimer le profil et créer ensuite un nouveau.
10. Si le problème persiste, contactez un technicien.

Créer des projets et des sous-projets

Pour utiliser une structure de sous-projet dans le cadre d'un projet, créer la structure de sous-projet lorsque le projet est créé.

1. Cliquer sur **Tools**(**Outils) > Project(Projet) > Create a Project(Créer un Projet).**
2. Dans **Name(Nom)** de **Project**(**projet)**, taper un nom.
3. (Facultatif) Pour utiliser les sous-projets, sélectionner les dossiers concernés puis utilisez les flèches pour les déplacer dans **Dossier des sous-projets**.

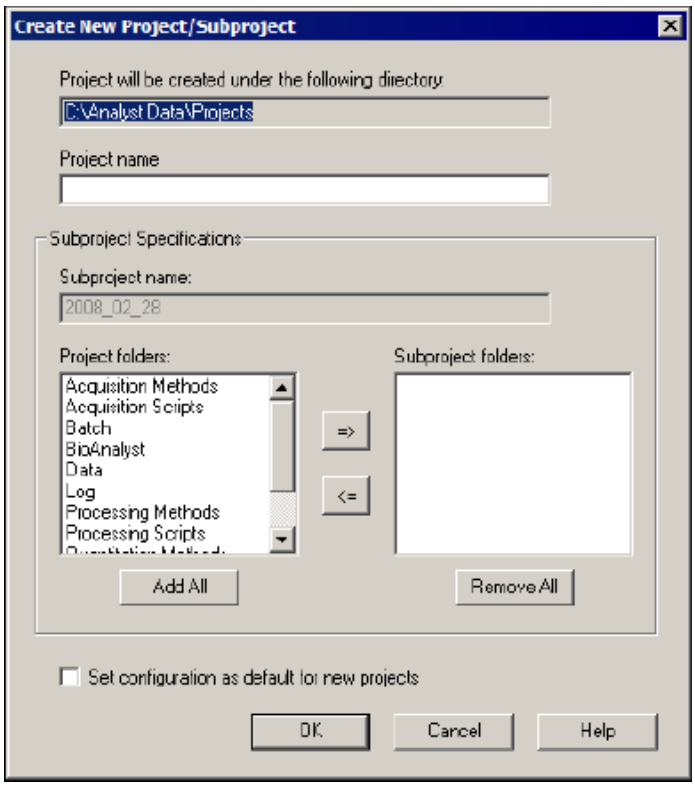


Figure 2-5 Boite de dialogue Créer un nouveau Projet/Sous-projet

4. (Si les sous-projets sont utilisés.) Dans **Nom du sous projet**, taper un nom pour le premier sous-projet ou utiliser la date existant.
5. Pour utiliser cette organisation de dossier projet et sous-projet pour tous les nouveaux projets, sélectionner dans **Paramétrer Configuration comme le choix par défaut des nouveaux projets**

   Tous les nouveaux projets sont créés avec ce dossier configuration.
6. Cliquer sur **OK**.

Créer un sous-projet

Les sous-projets ne peuvent être créés que dans le cadre d'un projet avec une structure de sous-projet.

1. Sur la barre d'outils du projet, dans **Projet**, sélectionner le projet.
2. Cliquer sur **Outils > Projet > Créer un Sous projet.**
3. Dans **Nom du sous projet**, taper un nom pour le sous-projet ou utiliser la date existante.
4. Cliquer sur **OK**.

Copie d'un sous-projet

L'utilisateur peut copier un sous-projet d'un autre projet qui a déjà des sous-projets. Si les sous-projets copiés contiennent des dossiers qui existent aussi dans le celui du projet, alors le logiciel utilise les dossiers au même niveau des projets.

1. Cliquer sur **Outils > Projet > Copier un Sous projet.**
2. Dans **Copier un sous-projet** , cliquer sur **Parcourir** pour aller dans le sous-projet source.
3. Cliquer sur **OK**.
4. Dans **Sous projet source,** sélectionner le sous projet.
5. Cliquer sur **Parcourir** pour aller à destination du sous-projet.
6. Dans **Sous projet cible**, taper un nom.
7. Cliquer sur **OK**.
8. Effectuer l'une des opérations suivantes :
    - Pour copier tous les dossiers et fichiers de **Sous-projet source** dans **Destination sous-projet,** sélectionner en cochant **Copier contenu**.
    - Pour copier uniquement les dossiers dans la même structure dans **Destination sous-projet,** s'assurer-que **Copier contenu** est effacé.
9. Cliquez sur **Copier**.

Dossiers projet installé

Trois dossiers de projet sont installés avec le logiciel : API Instrument, Par défaut, et Exemple.

Dossier API Instrument

Le dossier API Instrument est unique et très important pour le bon fonctionnement de l'instrumentation. Le dossier API Instrument contient les informations requises pour le réglage et l'étalonnage de l'instrumentation. Cette information comprend des fichiers de paramètres de réglage, des fichiers de référence, de données de l'instrumentation qui contiennent des informations sur l'étalonnage et la résolution et les méthodes d'acquisition utilisées pendant la syntonisation automatique. Le dossier API Instrument également contient les fichiers de données pour effectuer un réglage manuel à partir de la commande démarrage plutôt que Acquisition. Ces fichiers de données sont automatiquement enregistrés dans le dossier API Instrument dans le dossier Réglage Cache et nommés par la date et l'heure à laquelle ils ont été créés. Réglage Cache est automatiquement et régulièrement effacé.

Dossier par défaut

Le Dossier par défaut contient des dossiers qui sont présents dans de nouveaux projets pour lesquels il sert de modèle.

Dossier Exemple

Le dossier Exemple contient des exemples de méthodes et des fichiers de données. Les utilisateurs peuvent s'exercer à travailler avec Explorer ou Quantification à l'aide des fichiers

d'exemple de données. Les fichiers d'exemple sont triés dans des sous-dossiers par type d'instrument et par la zone d'application.

Sauvegardez le dossier API Instrument

Sauvegarder le dossier API Instrument régulièrement et après qu'un entretien de routine a été effectué.

1. Copier le dossier API Instrument et le coller dans un autre emplacement, de préférence dans un autre ordinateur, puis le renommer. Utiliser la date et une instrumentation de référence s'il y a plus d'une instrumentation quand le dossier est nommé; par exemple, API Instrument__4000QTRAP3_010107
2. Pour récupérer le dossier, renommer le dossier API Instrument actuel et copier la sauvegarde dans le dossier Projets et ensuite rechanger son nom de retour à API Instrument.

Tableau 2-1 Icônes de la barre d'outils

Icône	Nom	Fonction
	Nouveau sous-projet	Créer un sous-projet Les sous-projets peuvent uniquement être créés plus tard dans le processus si le projet a été initialement créé avec des sous-projets.
	Copier sous-projet	Copie un dossier sous-projet. Les sous-projets peuvent être copier seulement à partir d'un autre projet qui possède déjà des sous-projets. Si les mêmes dossiers existent tant au niveau du projet que du sous-projet, le logiciel utilise les dossiers de niveau du projet.

Exécuter l'option Vérifier les performances de l'instrumentation toutes les semaines ou après un nettoyage pour confirmer que le système fonctionne correctement. En général, l'étalonnage et la résolution pour le quadripôle faits pour 3 à 6 mois, à moins que le système ne perde son dispositif de dépression. Pour les systèmes LIT (piège à ions linéaire), la résolution doit aussi être faite pour 3 à 6 mois mais l'étalonnage doit être effectué environ une fois par mois. Si le système perd son dispositif à dépression, vérifier le calibrage et la résolution avant de l'utiliser. Pour plus d'informations sur le réglage et l'étalonnage, reportez-vous au *Guide de l'utilisateur avancé* et le *didacticiel du réglage manuel*.

Matériel requis

- Les solutions de réglage fournies dans le Kit de produits chimiques standard sont livrées avec le système. Si nécessaire, un nouveau Kit peut être commandé auprès de AB Sciex.
- Série de seringues étanches au gaz de 5 mL, 1 ml, et 250 µl.
- Tubulure d'échantillonnage PEEEK (rouge).

Conditions préalables

- S'assurer qu'une imprimante est disponible.
- S'assurer que la pulvérisation est stable et que les solutions sont réglées correctement.

Optimiser l'instrumentation

La procédure suivante décrit le contrôle des performances de l'instrumentation. Pour plus d'informations sur l'utilisation des options de contrôle des performances de l'instrumentation, se reporter à l'aide.

1. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate (Réglage et Calibrage),** double-cliquer sur **Manual Tuning (Réglage manuel)**.
2. Exécuter une méthode d'étalonnage et confirmer qu'il existe un TIC stable et que les crêtes d'intérêt sont présentes dans le spectre.
3. Dans la barre de navigation, sous **Tune and Calibrate (Réglage et Calibrage),** double-cliquer sur **instrument Optimization (Optimisation Instrumentation)**.

   La boite de dialogue Instrument Optimization (Optimisation Instrumentation) s'ouvre

   Le nom de l'instrumentation et le mode de fonctionnement en cours configuré dans le profil matériel actif est affiché en bas de la boîte de dialogue.
4. Cliquer sur **Vérifier les performances de l'instrumentation**.
5. Cliquer sur **Next (Suivant)**.
6. Cliquez sur **Approved Tuning (Réglage accepté)**.

7. Cliquer sur **Next (Suivant).**
8. Sélectionnez **Tuning Solution (Solution de réglage)**.

   En fonction de la solution choisie, différents modes sont disponibles.

   i. Cliquez sur une polarité.
   ii. Si disponible, cliquer sur **Q1** et **Q3**-dans **Quad**. Si disponible, cliquer sur les vitesses de balayage demandées.
   iii. Si disponible, cliquer sur les vitesses de balayage dans **LIT** .
   iv. Si disponible, cliquer sur MS/MS/MS options puis cliquer sur **Next (Suivant)**.
9. Si **Sélectionner un mode** s'ouvre, sélectionner **Automatic (Automatique)**, puis cliquer sur **Next (Suivant).**
10. Cliquez sur **GO (Aller)**.

    L'écran Verifying or Adjusting Performance (Vérification ou Performance ajustemen)t s'ouvre. Une fois le processus terminé, le Results Summary (récapitulatif des résultats) s'ouvre. Pour plus d'informations, reportez-vous l'aide.
11. En fonction des champs sélectionnés, l'utilisateur sera invité à modifier des solutions pour les différents types de balayages et polarités.

Vérifier ou régler les performances

Le coin supérieur gauche indique la partie de l'instrument qui est en train d'être réglé.

Current Spectrum (Spectre actuel) : Ce graphique affiche le spectre du balayage en cours, celui optimal sélectionné par le logiciel ou celui à la valeur actuelle paramétrée quand les résultats du logiciel sont visualisés en mode interactif.

Les Instrument Optimization Decision Plots (parcelles sur les décisions de l'optimisation de l'instrumentation), en haut à droite du graphique, affichent en dynamique les courbes d'intensité face à la tension des paramètres actuellement en cours d'optimisation.

Récapitulatif des résultats

La Results Summary (synthèse des résultats), illustrée à Figure 3-1 est un enregistrement de tous les paramètres de modification sur l'instrumentation faites par le logiciel d'optimisation de l'instrument Cela inclut l'emplacement des fichiers de données et les sauvegardes des paramètres de l'instrumentation comme les changements, étape-par-étape et leurs résultats, pendant l'optimisation. En outre, la synthèse des résultats affiche un rapport de vérification. Ce rapport contient un instantané du spectre de masse pour chaque masse concernée afin de vérifier les modes de balayage. Le spectre est étiqueté avec la masse ciblée, d'où elle vient, la masse a été trouvé, son décalage, la largeur de la crête et son intensité. Le spectre peut être utilisé comme un enregistrement visuel sur la forme de la crête sur la performance du mode de balayage. Un tableau récapitulatif des résultats suit les spectres.

Sommaire des résultats est enregistré comme un document dans le dossier indiqué en haut du rapport. Les utilisateurs peuvent imprimer le sommaire des résultats ou ouvrir un sommaire précédemment sauvegardé.

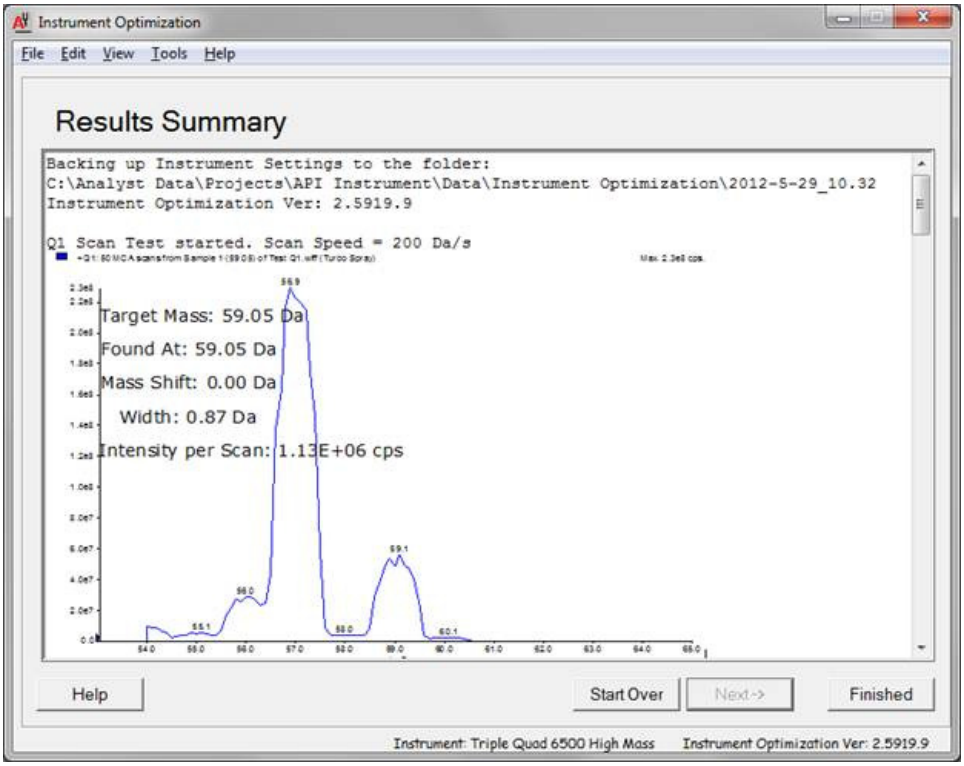


Figure 3-1 Récapitulatif des résultats

Méthodes d'acquisition de base 4

Une méthode d'acquisition se compose d'expériences et de périodes. Utiliser Acquisition Method Editor (Éditeur de la méthode d'acquisition) pour créer une séquence de périodes et d'expériences pour l'instrumentation et l'appareillage.

Créer des méthodes d'acquisition

Seuls les périphériques configurés dans du matériel actif, apparaitront sur la panneau du navigateur de la méthode d'acquisition. Tous périphériques ajoutés au profil matériel doivent également l'être aux méthodes d'acquisition existantes. Pour plus d'informations sur les périphériques, reportez-vous au guide d'installation *des périphériques.*

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire (Acquérir)**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method (Construire une méthode d'acquisition)**.
2. Dans l'onglet **Acquisition Method Properties (propriétés de la méthode d'acquisition),** sélectionner **Synchronisation Mode (mode de synchronisation)**.
3. Sélectionner la case à cocher **Auto-Equilibration (Équilibrage Auto) (En option)**
4. Entrez le temps d'équilibrage en minutes, si Équilibrage Auto-est sélectionné.
5. Dans le panneau **Acquisition Method (Méthode d'acquisition),** cliquer sur l'icône Masse Spec.
6. Dans l'onglet **MS**, sélectionner un type d'Analyst.
7. Taper les valeurs dans les champs prévus. Reportez-vous à Paramètres à la page 53.
8. Dans **Advanced MS** taper les valeurs dans les champs prévus. Reportez-vous à Paramètres à la page 53.
9. Cliquer sur l'icône d'un périphérique.
10. Sélectionner les paramètres pour les périphériques selon besoins.
11. Ajouter d'autres périodes et expériences.
12. Cliquer sur **File (Fichier)** >**Save (Enregistrer)**.

Ajouter une expérience

1. Cliquer avec le bouton droit sur la période, puis cliquer sur **Add Experiment (Ajouter expérience)**.

   Une expérience est ajoutée en dessous de la dernière expérience de la période.
2. Dans le panneau **Acquisition Method Editore (Éditeur de méthode d'acquisition),** sélectionner le périphérique approprié ou les paramètres de l'instrumentation.

Ajouter une période

- Dans le panneau **Acquisition Method (Méthode d'acquisition)**, cliquer avec le bouton droit sur l'icône **Masse Spec**, puis cliquer sur **Add Period (Ajouter période)**.

  Une période est ajoutée sous la dernière période créée.

Copier une expérience dans une période

Condition préalable : Méthode à multi-périodes

- Dans le **volet** Acquisition Method (Méthode d'acquisition), appuyer sur CTRL, puis faire glisser l'expérience vers la période.

  L'expérience est copiée sous la dernière expérience de la période.

Copier une expérience dans une période

Utiliser cette procédure pour ajouter les mêmes expériences ou similaires pour une période si la plupart ou la totalité des paramètres sont les mêmes.

- Cliquer avec le bouton droit sur expérience puis cliquer sur **Copy this experiment (Copier cette expérience)**.

Techniques de balayage

MS: dans MS scans, pouvant être un balayage MS simple, les ions sont séparés en fonction de leur rapport masse sur charge. Un balayage MS simple peut être utilisé pour déterminer le poids moléculaire d'un composé. Le balayage MS simple peut également être considéré comme un balayage de référence Le balayage MS ne fournit aucune information comme la composition chimique des ions ou le ratio masse sur charge. Effectuer un type de balayage MS/MS ou MS/MS/MS pour obtenir plus d'informations sur les ions.

MS/MS: les balayages MS/MS sont utilisés pour aider à identifier ou à confirmer les spécimen moléculaires. Dans MS/MS, un ion précurseur peut être fragmenté dans une des deux zones.

- Pour une instrumentation à triple quadripôles, la fragmentation se produit dans la cellule de collision.
- Pour l'instrumentation LIT, la fragmentation peut se produire dans la cellule de collision ou dans la trappe d'ions linéaire (LIT).

Avec suffisamment d'énergie utilisée, l'ion précurseur se fragmente pour produire des ions 2ème génération.

MS/MS/MS: Les balayages MS/MS/MS avec l'instrumentation LIT produisent une séquences de plus que le balayage MS/MS. Un fragment qui est produit dans la cellule de collision est fragmenté plus loin dans le piège pour donner plus information sur la structure moléculaire de l'ion.

Types de balayage en mode quadripôle

L'instrumentation du triple quadripôle a une haute sensibilité MRM (Surveillance des réaction multiples), capacité requise pour la quantification des expériences. En outre, elle a des types de

balayage spécifiques comme l'ion précurseur et le balayage à perte neutre qui permet une recherche avancée sur les composants des échantillons.

Q1 MS (Q1): Un balayage complet avec le premier quadripôle (Q1). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour chaque masse dans la plage du balayage.

Q1 Ions multiples (Q1 MI): un type de balayage à largeur nulle avec le premier quadripôle (Q1). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour les masses spécifiées uniquement.

Q1 MS (Q3): Un balayage complet avec le troisième quadripôle (Q3). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour chaque masse dans la plage du balayage.

Q1 Ions multiples (Q3 MI): un type de balayage à largeur nulle avec le troisième quadripôle (Q3). L'intensité d'ionisation est renvoyée pour les masses spécifiées uniquement.

MRM (MRM): Un balayage MS/MS dans lequel un ion sélectionné par l'utilisateur passe par le premier quadripôle (Q1) et est fragmenté dans le second quadripôle (Q2). Le troisième quadripôle (Q3) est ensuite utilisé pour spécifier quel fragment d'ion pénètre dans le détecteur. Ce mode de balayage est principalement utilisé pour la quantification.

Ion produit (MS2): le balayage complet MS/MS où le premier quadrupole (Q1) est réglé pour transmettre un ion précurseur spécifique et le troisième quadripôle (Q3) recherche sa gamme de masse. Utilisé pour identifier tous les produits d'un ion précurseur particulier.

Ions précurseurs (Prec): balayage MS/MS où le troisième quadripôle (Q3) est réglé sur un rapport masse sur charge pour transmettre un ion produit spécifique et le premier quadripôle (Q1) balaye la fourchette de masse. Utilisé pour confirmer la présence d'un ion précurseur ou plus couramment utilisé pour identifier les composés partagés d'un ion produit commun.

Perte de neutre (NL) : balayage MS/MS où tant le premier quadripôle (Q1) que le troisième (Q3) balayent une gamme de masse, une masse fixe à part. Une réponse est observée si l'ion choisi par le premier analyseur se fragmente en perdant la perte neutre (masse fixe) spécifiée. Utilisé pour confirmer la présence d'un ion précurseur ou plus couramment utilisé pour identifier les composés partagés d'un ion produit commun.

Types de balayage en mode LIT

Le balayage en mode LIT utilise le troisième quadripôle, Q3, comme une trappe à ions linéaire. Les ions sont piégés et stockées dans le piège avant d'être analysés, procurant une sensibilité accrue. De plus, MS/MS/MS peut être effectuée dans le piège à ions linéaire, fournissant plus d'informations sur l'échantillon.

MS amélioré (EMS) : Les ions sont balayés en Q1 vers la trappe à ion linéaire où ils sont collectés. Ces ions sont numérisés en Q3 pour produire un type de spectre MS simple.

Multi-Charge améliorée (EMC) : Cette analyse est similaire au balayage EMS sauf qu'avant le balayage des ions de la trappe, pendant un certain délai, des ions à faible charge (principalement des ions à liaison simple) sont à même de s'échapper, par choix, de la trappe d'ions linéaire. Lorsque les ions retenus sont balayés, la population d'ions à multiple charges sont majoritaires dans le spectre qui en résulte.

Ion produit amélioré (PEV): Ce type de balayage est utilisé pour obtenir un spectre de haute qualité MS/MS sur un ion spécifique. La fragmentation se fait dans la cellule de collision et fournit ainsi de riches informations du spectre typique MS/MS tirées de la fragmentation réalisée par collision. Dans ce mode de balayage, l'ion précurseur à fragmenter est sélectionné d'abords en Q1 avec fourchette de masse de 1 à 4 Da de large, les autres ions étant filtrés. L'ion précurseur est fragmenté par les gaz de dissociation après collision (CAD) dans la cellule de collision Q2.

Les ions fragmentés générés sont capturés dans la trappe à ions linéaire puis balayés à l'une des trois vitesses de balayage en fonction de la résolution de l'ion.

Pour des expérience IDA, le produit du champ est définie à 30 Da par défaut et cette valeur ne doit pas être changée.

Amélioration de la résolution (Enhanced Resolution) (ER): Ce balayage est similaire au balayage EMS sauf qu'une petite masse de 30 Da autour de la masse du précurseur est balayée hors de la trappe à ions linéaire à la plus faible vitesse de balayage pour produire une fenêtre étroite de la meilleure résolution du spectre.

MS/MS/MS (MS3): Dans ce mode de balayage, un ion précurseur est sélectionné par Q1 et fragmentée avec par dissociation après collision dans la cellule de collision Q2. Les ions produits en résultant sont tous transmis à la trappe à ions linéaire où un ion simple est produit puis isolé. L'ion isolé est davantage fragmenté dans la trappe à ion linéaire et l'ion qui en résulte est balayé hors de cette trappe à l'une des trois vitesses de balayage. Comme avec n'importe quelle technique de trappe CID, il y a une faible ablation de masse lors de la seconde étape du MS/MS par l'obligation d'avoir un fragment avec la masse la plus basse et un précurseur simultanément stable dans le piège. Pour l'instrumentation QTRAP®, cela signifie que nous perdons des ions inférieurs à 28 pour cent de la masse de l'ion précurseur durant l'expérience MS3. Ce phénomène est souvent appelée règle du 1/3 en moins

Time Delayed Frag (Fragmentation retardée) (TDF): ions produits générés et produits dans la trappe à ions linéaire. Au cours de la première partie de la période de la collecte, les ions à la masse la plus faible ne sont pas collectés dans la trappe à ions linéaire. Au cours de la deuxième partie de la période de collecte, toutes les masses dans la fourchette déterminée sont collectées. Le spectre résultant de l'ion produit amélioré est simplifié par rapport à ceux de type EPI. La nature des spectres aide dans l'interprétation de la structure et de la fragmentation de la molécule désignée. Ce type d'Analyst n'est pas applicable aux systèmes QTRAP 5500 et 6500.

Sur l'acquisition de données spectrales

Les données spectrales peuvent être acquises avec l'un des trois modes suivants, comme illustré dans le tableau suivant.

Tableau 4-1 Acquisition de données spectrales

Mode	Description
Profil	La valeur par défaut est 0,1 Da. Le profil des données est constitué de données générées par l'instrumentation et correspond à l'intensité enregistrée sur une série de valeurs de masse légèrement espacées uniformément. Par exemple, pour une fourchette de masse de 100 Da à 200 Da séparée de 0,1, l'instrument balaye 99,95 à 100,05 (enregistrements en valeur 100), 100,05 à 101,15 (enregistrements en 101) …199,95 à 200,05 (enregistrements en valeur 200).
Saut de crête ou peak hopping	La valeur par défaut est 1,0 Da. Le peak hopping est un mode de fonctionnement d'un spectromètre de masse avec des étapes espacées large (environ 1 Da). Ce mode a l'avantage de la rapidité (moins d'étapes de données) mais avec une perte d'information sur la forme de la crête.

Tableau 4-1 Acquisition de données spectrales

Mode	Description
Centroïde	L'instrumentation balaye en mode Profil mais crée un centroïde des données, remplaçant la crête trouvée avec une intensité pondérée au centre de gravité de chaque pic. Les données centroïdes ont l'avantage de réduire sensiblement la taille du fichier. L'inconvénient est que l'information sur la forme de la crête est perdue et si des données ont été recueillies en centroïde, rien ne peut être modifié. Il est recommandé d'utiliser le mode Profil et une acquisition de données centroides

Paramètres

Les paramètres de fonctionnement sont les réglages des paramètres de l'instrumentation en cours d'utilisation.

- Paramètres source et gaz (ces paramètres peuvent changer en fonction de la source d'ions utilisée)
- Paramètres composés
- Paramètres de résolution
- Paramètres du détecteur

Pour plus d'informations sur la valeur des paramètres de l'instrumentation et leur fourchette, reportez-vous à Annexe A: Instrumentation Série 6500 Exigences et paramètres

La figure suivante montre l'emplacement des paramètres sur le passage de l'optique ionique.

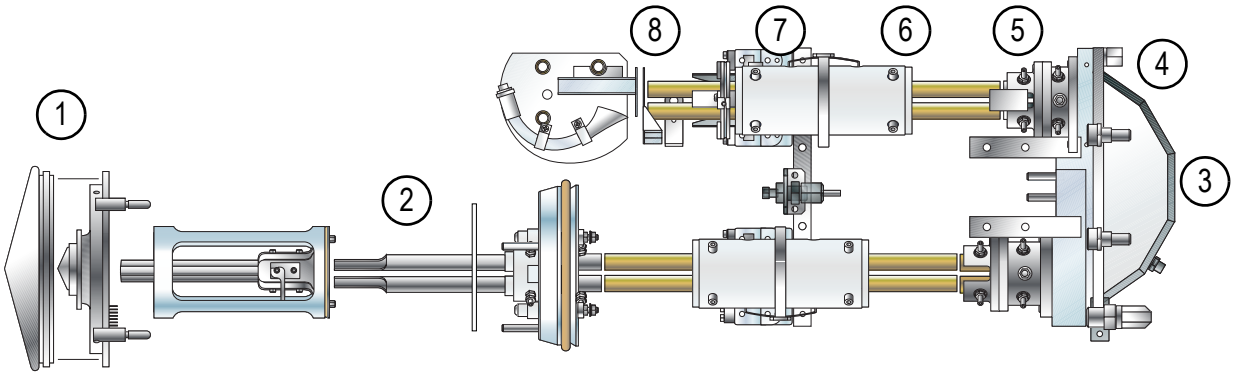


Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
1	IS (Tension pour le transfert d'ions)	Source et gaz	Pour la source PhotoSpray®le paramètre de la source contrôle la tension qui transfère les ions provenant de la zone de ionisation primaire vers la plaque à trou rideau.	Tous

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
1	NC (courant de l'aiguille)	Source et gaz	Le paramètre NC contrôle le courant appliqué sur l'aiguille de décharge par effet corona dans la sonde APCI utilisée dans la source Turbo V™. La décharge ionisent les molécules de solvant, qui à leur tour ionisent les molécules de l'échantillon.	Tous
1	ihe (Interface chauffage)	Source et gaz	Le paramètre ihe permet d'enclencher ou d'arrêter le chauffage de l'interface. Chauffer l'interface permet d'optimiser le signal d'ionisation et empêche la contamination des valeurs de l'optique ionique. Il doit toujours rester en marche. Le bouton qui contrôle le chauffage de l'interface lit ON (MARCHE) quand il est en marche.	Tous
1	IHT (température du chauffage de l'interface)	Source et gaz	Le paramètre IHT contrôle la température du chauffage de l'interface NanoSpray® et est uniquement disponible si la source d'ions NanoSpray et l'interface sont installées.	Tous
1	sdp	Source et gaz	Le paramètre sdp contrôle la sélection des sondes de la source d'ions DuoSpray™: Sonde TurboIonSpray ou APCI	

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
1	DP (défragmentation potentielle)	Composé	Le paramètre DP contrôle la tension au niveau de l'orifice, qui contrôle la capacité de défragmenter les ions entre l'orifice et le filtre (skimmer) (ou pour les systèmes avec un guide d'ions QJet®, entre l'orifice et le guide d'ions QJet. Il est utilisé pour minimiser les grappes de solvant qui peuvent rester sur l'ion échantillon après son entrée dans la chambre à dépression et si besoin pour fragmenter les ions. Plus la tension est élevée, plus l'énergie impartie aux ions est importante. Si le paramètre DP est trop élevée, une fragmentation indésirable est possible. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	Tous
1	CUR (rideau de gaz)	Source et gaz	Le paramètre CUR contrôle le débit du gaz de l'interface du Curtain Gas™ . L'interface de Curtain Gas est située entre la plaque rideau et l'ouverture. Elle aide à l'évaporation du solvant et empêche les gouttelettes de solvant d'entrer et de contaminer l'optique ionique. Le débit de gaz doit être maintenu aussi haut que possible sans perdre de la sensibilité.	Tous
1	IS (tension du IonSpray)	Source et gaz	Le paramètre IS contrôle la tension appliquée à l'électrode qui ionise l'échantillon dans la source d'ions. Il dépend de la polarité et affecte la stabilité de la pulvérisation et de la sensibilité. Ce paramètre peut être dépendant des composés et doit être optimisé pour chaque composé.	Tous
1	GS1 (Gaz 1)	Source et gaz	Le paramètre GS1 contrôle le gaz du nébuliseur. Le gaz du nébuliseur contribue à générer de petites gouttelettes du débit de l'échantillon et affecte la stabilité et la sensibilité de la pulvérisation.	Tous

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
1	GS2 (Gaz 2)	Source et gaz	Le paramètre GS2 contrôle le gaz auxiliaire ou pulsé. Il est utilisé pour aider à évaporer le solvant pour produire des ions d'échantillon en phase gazeuse.	Tous
1	TEM (température)	Source et gaz	Le paramètre TEM contrôle la température du gaz pulsé dans la sonde TurboIonSpray® ou celle de la sonde dans la sonde du nébuliseur chauffé (ou APCI)	Tous
2	EP (entrée potentielle)	Composé	Le paramètre EP contrôle la différence potentielle entre la tension sur Q0 et la terre. La possibilité d'une entrée guide et concentre les ions à travers la zone Q0 sous haute pression. Utiliser la valeur prédéfinie.	Tous
2	Q0 La phase de piégeage	Composé	Le paramètre du piégeage Q0 contrôle le stockage des ions dans la zone Q0. Il est utilisé pour augmenter la sensibilité et le cycle de travail en piégeant les ions dans la zone Q0 alors que les ions sont éjectés en masse sélectivement du LIT. Utilisation pour fixer le temps de remplissage avec ce paramètre. Cochez ou décochez la fonctionnalité basée sur l'expérience. Le temps de remplissage fixe recommandé à utiliser avec le piégeage Q0 est de 20 ms ou plus.	EMS, EMC, EPI, ER, et MS/MS/MS,

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
3	Gaz CAD	Source et gaz	Le paramètre CAD contrôle la pression du gaz de collision de gaz dans la cellule de collision pendant les balayages Q3, MS/MS et LIT. Pour les balayages Q3, le gaz de collision permet de concentrer les ions lors de leur passage dans cellule de la collision; le pré réglage pour le paramètre CAD est en mode fixe. Pour les balayages MS/MS, le gaz de collision aide dans la fragmentation de l'ion précurseur. Lorsque les ions précurseurs entrent en collision avec le gaz, ils peuvent se dissocier pour former des ions produits. Pour les balayages LIT, le gaz de collision permet de concentrer et piéger les ions dans le LIT. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	Q3 MI, Q3 MS, MRM, Prec, NL, EMS, ER, EPI, MS/MS/MS, EMC, et TDF
3	CE (énergie de collision)	Composé	Le paramètre CE contrôle la différence de potentiel entre Q0 et Q2 (cellule de collision). Il est seulement utilisé dans les balayages MS/MS. C'est la quantité d'énergie que les ions précurseurs reçoivent quand ils ont accélérés dans la cellule de collision, où ils entrent en collision avec les molécules de gaz et se fragmentent. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	MRM, MS2, Prec, NL, et LIT

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
3	CES (Propagation de l'énergie de collision)	Composé	La paramètre CES, en conjonction avec l'énergie de collision (CE), détermine laquelle est appliquée à la masse des précurseurs dans un ion produit amélioré (PEV) ou dans l'expérience MS/MS/MS (MS3) quand CES est utilisé. En entrant une valeur de propagation de l'énergie de collision, CES est automatiquement activé. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	EPI et MS/MS/MS
4	CXP (Possibilité de sortie de la cellule de collision)	Composé	Le paramètre CXP n'est utilisé que dans Q3 et les balayages MS/MS où il transmet les ions dans Q3. Utiliser la valeur prédéfinie et optimiser pour le composé.	Q3, MRM, MS2, Prec et NL
4	TDF CE (Énergie de collision pour une fragmentation décalée)	Composé	C'est la quantité d'énergie que les ions précurseurs reçoivent quand ils sont accélérés dans Q3, où ils entrent en collision avec les molécules de gaz et se fragmentent. Utiliser la valeur prédéfinie.	TDF
5	Q3 Barrière d'entrée	Composé	Le paramètre de barrière d'entrée Q3est utilisé pour le transfert des ions de Q2 dans le LIT Utiliser la valeur prédéfinie.	EMS, EMC, EPI, ER, et MS/MS/MS,
5	Q3 temps d'expulsion	Composé	Le paramètre du temps d'expulsion Q3 contrôle la quantité de temps que les ions simples ont enlevés du LIT. Utiliser la valeur prédéfinie.	EMC
	Temps de fragmentation MS/MS/MS	Composé	Le paramètre de temps de fragmentation MS/MS/MS contrôle la durée d'application de l'énergie servant à l'excitation. Il est utilisé en combinaison avec l'énergie d'excitation pour fragmenter le second ion précurseur isolé. Utiliser la valeur prédéfinie.	MS/MS/MS

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
6	Barrière MCS (Séparation à charge multiple)	Composé	Le paramètre de la barrière MCS contrôle la tension utilisée pour éliminer les ions simples chargés de LIT. Utiliser la valeur prédéfinie.	EMC
6	Q3 temps de refroidissement	Composé	Le paramètre du temps de refroidissement Q3 contrôle la quantité de temps que les ions précurseurs utilisent pour se refroidir avant la collecte de leurs ions générés. Utiliser la valeur prédéfinie.	TDF
7	Durée de remplissage déterminé du LIT	Composé	Le paramètre de la durée de remplissage déterminé du LIT contrôle la durée de remplissage du LIT en ions. Utiliser la valeur prédéfinie.	EMS, EMC, EPI, ER, et MS/MS/MS,
7	DFT (Durée de remplissage dynamique)	Composé	La DFT va calculer dynamiquement la durée de collecte des dans le LIT sur la base du signal d'entrée des ions. Quand la DFT est allumée, le signal est optimisé pour augmenter la sensibilité ou réduire l'espace de chargement. Cochez ou décochez la fonctionnalité basée sur l'expérience. Dans **Tools (Outils)** >**Settings (Réglages)** > **Method Options (Choix Méthode)** dialogue, les réglages de la durée de remplissage sont optimisés pour la vitesse de balayage de 10000 Da/s. Ces réglages sont également adaptés pour d'autres vitesses de balayage du LIT.	EMS, EPI, ER, et MS/MS/MS

Figure 4-1 Paramètres et passage de l'optique ionique (Suite)

Article	Paramètre	Type de paramètre	Usage	Type d'analyse
8	EX2	Détecteur	La deuxième lentille de sortie (EX2) protège le LIT de l'arrivée d'une haute tension sur le détecteur. Le paramètre EX2 contrôle la tension appliquée au LIT. Ce paramètre n'a pas besoin d'être optimisé, et par défaut il est réglé à une valeur fixe et n'est pas affichée dans l'interface du logiciel d'Analyst.	Q1, Q3, MS/MS, FIT
8	CEM (CEM)	Détecteur	Le paramètre CEM contrôle la tension appliquée au détecteur. La tension contrôle la réponse du détecteur.	Tous

Icônes Acquisition Method Editor (éditeur des méthodes d'acquisition)

Tableau 4-2 Icônes Acquisition Method Editor (éditeur des méthodes d'acquisition)

Icône	Nom	Fonction
	Spécification de la masse	Affiche l'onglet MS dans l'éditeur de la méthode d'acquisition
	Période	Cliquer avec le bouton droit pour ajouter une expérience, un niveau de critère IDA ou supprimer la période.
	Auto-échantillonneur	Ouvre l'onglet des propriétés de l'auto-échantillonneur
	Pompe de la seringue	Ouvre les propriétés de la pompe de la seringue.
	Four à colonne	Ouvre les propriétés du four à colonne
	Soupape	Ouvre l'onglet des propriétés de la soupape
	DAD	Ouvre l'éditeur de la méthode DAD. Pour plus d'informations sur le fichier DAD, reportez-vous à Afficher données DAD à la page 87
	ADC	Ouvre l'onglet des propriétés de ADC. Pour plus d'informations sur le fichier ADC, reportez-vous à Afficher données ADC à la page 80

Un lot est un ensemble d'informations sur les échantillons. Les lots indiquent au logiciel l'ordre dans lequel analyser les échantillons. Pour plus d'informations sur les rubriques suivantes, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

Régler les options de file d'attente

La queue prend dans la liste, un par un chaque échantillon et le traite avec la méthode d'acquisition choisie. Après que tous les échantillons ont été acquis, la file d'attente s'arrête et l'instrument passe en mode veille. En mode veille, les pompes LC sont mises hors tension et l'alimentation sur certaines instrumentations est coupée.

L'utilisateur peut modifier le temps d'attente après que la dernière acquisition soit faite et avant de mettre l'instrument en mode de veille. Pour plus d'informations sur les autres champs dans la boite de dialogue Options file d'attente, reportez-vous à l'aide.

1. Dans la barre de navigation, cliquer sur **Configure (Configurer)**.
2. Cliquer sur **Tools(Outils) > Settings (Paramètres) > Queue Options (Options de file d'attente)**.

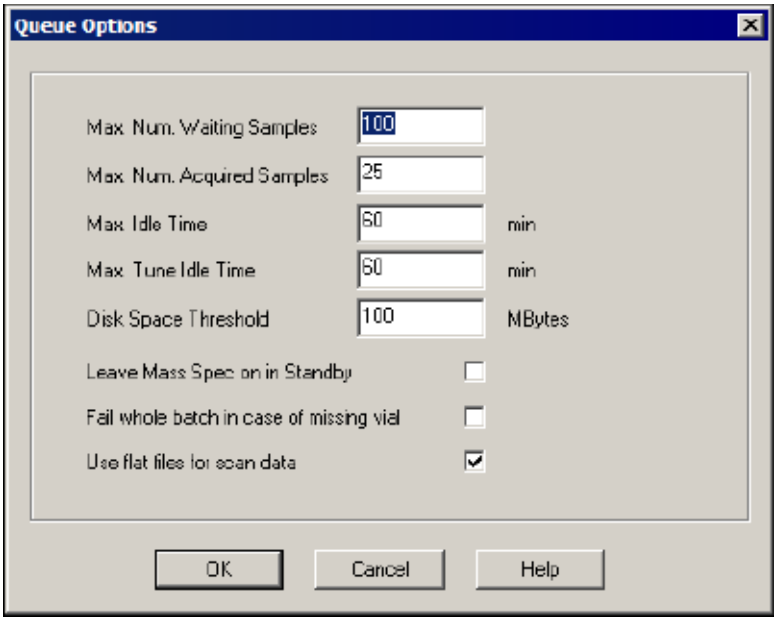


Figure 5-1 Boite de dialogue Options File d'attente

3. Dans **Max Idle Time (Temps d'inactivité maximal)**, saisir le temps d'attente après acquisition avant de passer en mode veille. La valeur prédéfinie est de 60 mn.
4. En cas d'utilisation de bouteilles de gaz, régler le temps en s'assurant que le gaz dans les cylindres n'est pas déchargée.

5. Si une méthode LC est utilisée, alors, avant le démarrage de la procédure, s'assurer qu'il y a suffisamment de solvant dans les réservoirs pour le débit primaire pour l'exécution de l'échantillon et le temps d'inactivité maximal.

Créer et soumettre un lot

Pour plus d'informations sur le rajout d'une quantification sur un lot, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

1. Dans la barre de navigation, sous **Acquire (Acquérir)**, double-cliquez sur **Build Acquisition Method (Construire une méthode d'acquisition)**.

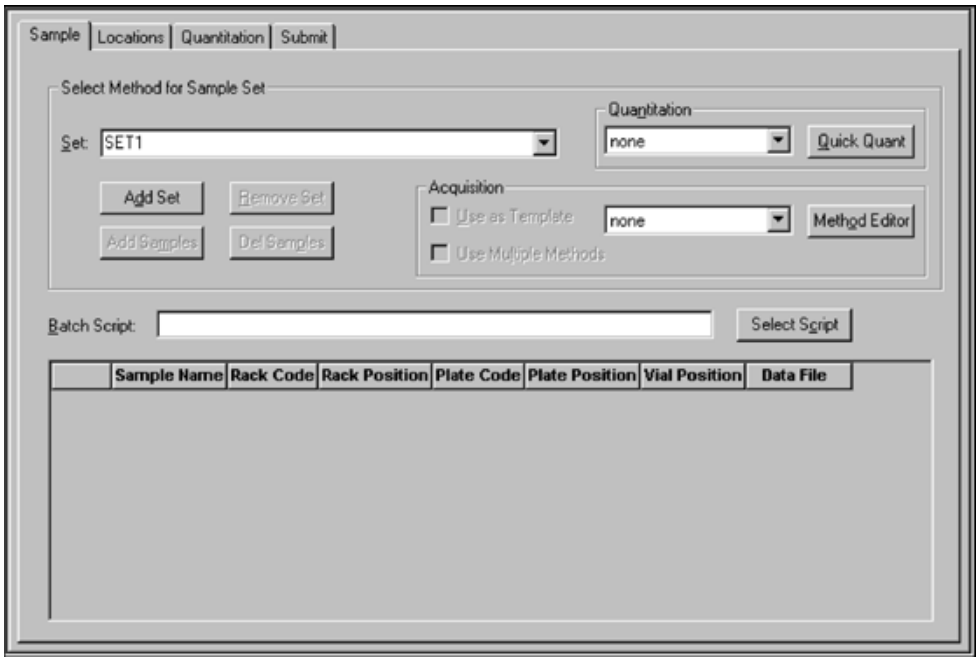


Figure 5-2 Éditeur de lot

2. Dans **Sample (échantillon),** dans **Réglage**, tapez un nom.
3. Cliquer sur **Add Set (Ajouter un ensemble)**.
4. Cliquer sur **Add Samples (Ajouter Échantillons)**.

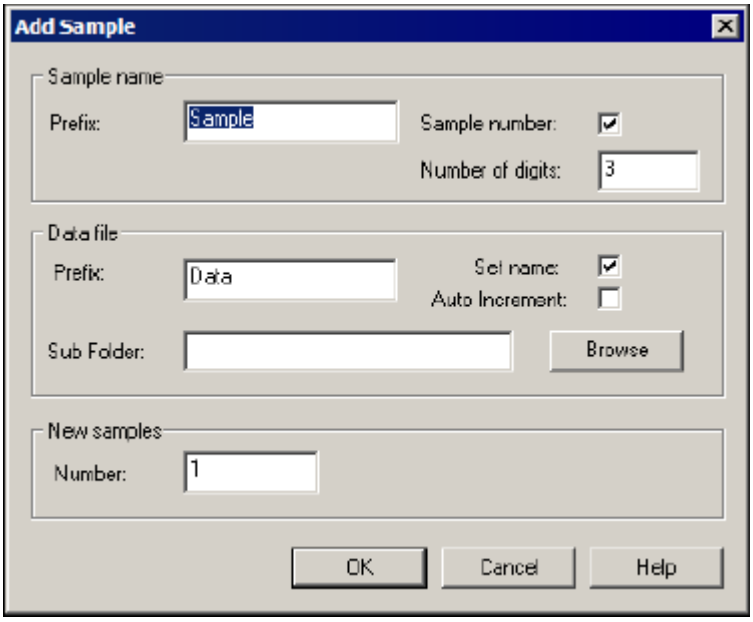


Figure 5-3 Boite de dialogue Ajouter Échantillon

5. Dans **la section** Nom de l'échantillon, dans **Préfixe** entrez un nom pour les échantillons.
6. Pour ajouter une numérotation progressive à la fin du nom de l'échantillon, sélectionner la case **Numéro d'échantillon**.
7. Si le **Numéro d'échantillon** est sélectionnée, dans **Nombre de chiffres**, taper le nombre de chiffres à inclure dans le nom de l'échantillon.

   Par exemple, si 3 est saisi, un exemple des noms pourrait être samplename001, samplename002, samplename003.
8. Dans la **Data file (Fichier de données)** , dans **Prefix (Préfixe)**, entrer un nom pour le fichier de données qui stockera les informations relatives à l'échantillon.
9. Sélectionner **Set name (Nom de l'ensemble)** à utiliser comme partie intégrante du nom du fichier de données.
10. Sélectionner **Auto Increment (Auto incrémentation)** pour incrémenter automatiquement les noms de fichiers de données.

Remarque : Les données de chaque échantillon peuvent être stockées dans le même fichier de données ou séparées. Les noms du fichier de données auront un suffixe numérique commençant par 1.

11. Dans **Sub Folder (Sous dossier)**, taper un nom.

    Le classeur est stocké dans le dossier de données pour le projet actuel. Si le champ du sous-dossier est laissé vide, le fichier de données est stocké dans le classeur de données et un sous-dossier n'est pas créé.
12. Dans **New Samples (Nouveaux échantillons)**, dans **Number (Numéro)**saisir le chiffre des nouveaux échantillons.
13. Cliquer sur **OK**.

Le tableau des échantillons complète les noms des échantillons et les noms des fichiers de données

Conseil ! Fill Down (Remplir vers le bas) et Auto Increment (Auto incrémentation) sont des options disponibles dans le menu contextuel une colonne de tête seule ou plusieurs lignes d'une colonne sont sélectionnés.

14. Dans **Sample (Échantillon)** dans **Acquisition (Acquisition)**, sélectionner une méthode à partir de la liste.

    En fonction de la manière dont le système est configuré, les informations spécifiques à l'auto-échantillonneur doivent être entrées. Même si le volume d'injection est défini dans la méthode, il peut être modifié pour un ou plusieurs échantillons en changeant la valeur dans la colonne volume d'injection.

Conseil !Pour utiliser des méthodes différentes pour certains des échantillons dans cet ensemble, sélectionner la case Multiple Methods (Méthodes multiples). La colonne Acquistion Method (Méthode d'acquisition) est indiquée dans le tableau d'échantillon. Sélectionner la méthode d'acquisition pour chaque échantillon dans cette colonne.

15. Pour modifier les volumes d'injection à partir des volumes répertoriés dans la méthode, dans **Inj. Colonne volume (µl)** , saisissez le volume d'injection pour chaque échantillon.
16. Pour définir les emplacements des échantillons, effectuer l'une des opérations suivantes :
    - Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot. à la page 67
    - Sélectionne Positions Fioles via l'onglet Emplacements à la page 68
17. Cliquez sur **Submit (Envoyer)**.
18. Si le **Submit Status(Statut Envoyer)** contient un message sur l'état du lot, procéder de l'une des manières suivantes :
    - Si le message indique que le lot est prêt pour être ernvoyé, passez à l'étape 19.
    - Si le message indique que le lot n'est pas prêt, apporter les changements comme indiqué par le message.
19. Cliquez sur **Sbmit (Envoyer)**.

Changer l'ordre de l'échantillon

L'ordre des échantillons peut être modifié avant qu'ils ne rentre dans la file d'attente.

- Dans l'onglet Envoyer, double-cliquer sur un des nombres à l'extrême gauche du tableau (une case très pâle est visible), et puis les faire glisser vers le nouvel emplacement

Acquérir les données

Le système ne doit pas être en mode Réglage lorsque l'acquisition de l'échantillon a démarré. Aussi, si le système a déjà été exécuté dans la journée, et n'a pas encore été mis en mode veille, l'acquisition de l'échantillon démarre automatiquement.

1. Dans la barre de navigation, cliquer sur **Acquire (Acquérir)**.
2. Cliquer sur **Afficher > échantillon en file d'attente** .

   Le gestionnaire de file d'attente s'ouvre avec tous les échantillons soumis.

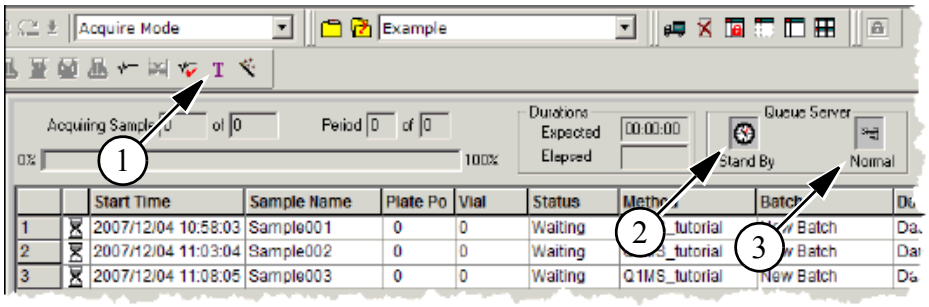


Figure 5-4 Gestionnaire de file d'attente

Article	Description
1	L'icône de réglage ne doit pas être enfoncé.
2	Statut de la file d'attente.
3	Le serveur de file d'attente doit être en mode Normal. Reportez-vous à Statut de la file d'attente. à la page 72.

3. Cliquer sur **Acquire (Acquérir) > Start Sample (Démarrer échantillon)**.

Régler les emplacements de l'échantillon dans l'Éditeur de lot.

Si un auto-échantillonneur est utilisé dans la méthode d'acquisition, alors les positions des fioles d'échantillons doivent être définies dans l'acquisition par lot. Définir l'emplacement de l'échantillon dans l'onglet Emplacements. Pour plus d'informations sur la création de lots, reportez-vous à Créer et soumettre un lot à la page 64

Remarque : En fonction de l'usage de l'auto-échantillonneur, il peut ne pas être nécessaire de rentrer les détails dans les colonnes additionnelles.

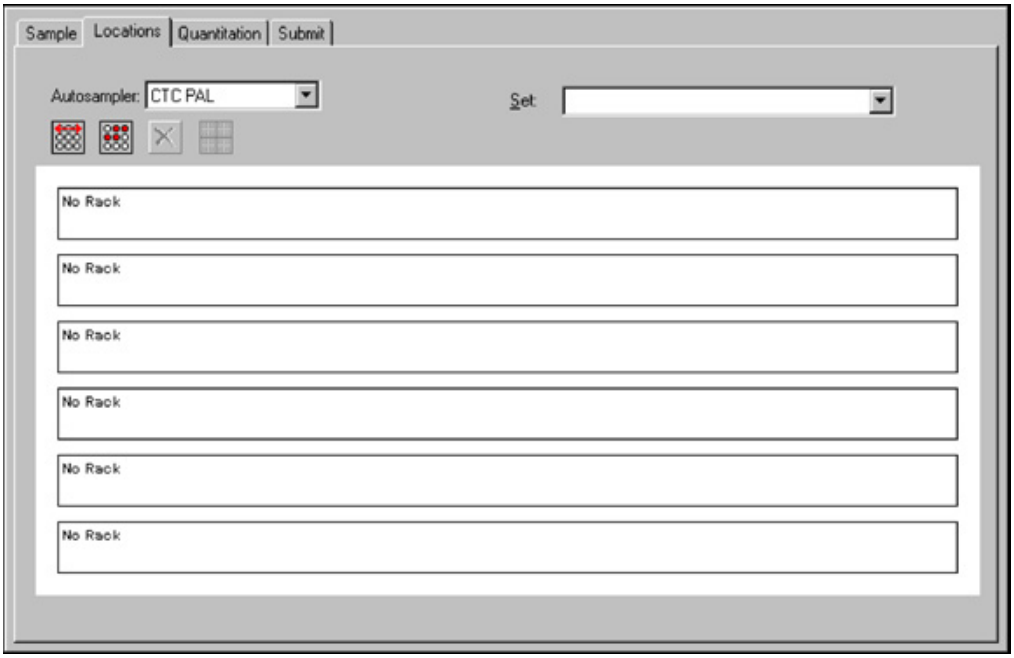
1. Dans **Sample (Échantillon),** , dans **Set (Réglage)**, tapez le réglage
2. Pour chaque échantillon dans l'ensemble, faire ce qui suit si nécessaire:
   - Dans la colonne **Rack Code (Code Rack)**, sélectionner le type de rack.
   - Dans la colonne **Rack Position (Position Rack)**, sélectionner la position du rack dans l'auto-échantillonneur.

- Dans la colonne **Plate Code (Code Plaque)**, sélectionner le type de plaque.
- Dans la colonne **Plate Position (Position Plaque)**, sélectionner la position de la plaque sur le rack.
- Dans la colonne **Vial Position (Position Fioles)**, sélectionner la position des fioles dans la plaque ou le bac.

3. Enregistrer le fichier.

Sélectionne Positions Fioles via l'onglet Emplacements

1. Dans le **Batch Editor (Éditeur de lot)**, cliquer sur **Emplacement**.



2. Dans **Set (Réglage),** sélectionner le réglage.
3. Dans **Autosampler (Auto-échantillonneur),** sélectionner l'auto-échantillonneur.

   Le nombre approprié d'espaces du rack pour l'auto-échantillonneur est illustré dans le graphique du rack.
4. Dans l'espace associé avec le rack, cliquer avec le bouton droit de la souris, puis sélectionner le type de rack.

   Les plaques ou bacs sont indiqués dans le rack.
5. Double-cliquer sur l'un des rectangles.

   Les cercles indiquent les puits ou les flacons pour l'apparition de la plaque ou du bac.
6. Pour sélectionner un échantillon marqué par ligne ou colonne, cliquez sur **ligne/ colonne Sélection**.

Si le bouton affiche une ligne horizontale rouge, l'éditeur de lot marque les échantillons par ligne. Si le bouton affiche une ligne verticale rouge, l'éditeur de lot marque les échantillons par colonne.

7. Cliquer sur le puits d'échantillon ou fioles pour être analysés. Cliquer sur un puits sélectionné une nouvelle fois pour effacer.
8. Enregistrer le fichier.

Conseil !Pour remplir automatiquement les échantillons, maintenez la touche Maj enfoncée, puis cliquez sur le premier et le dernier flacon dans un ensemble. Pour effectuer plusieurs injections à partir du même flacon, maintenez la touche Ctrl enfoncée, puis cliquez sur l'emplacement de la fiole. Le cercle rouge devient vert.

Arrêter l'acquisition d'échantillons

Lorsqu'une acquisition d'échantillon est arrêté, l'acquisition en cours se termine avant qu'elle soit interrompue.

1. Dans le Gestionnaire de file d'attente, cliquer sur l'échantillon dans la file d'attente après le point où l'acquisition devrait s'arrêter.
2. Dans la barre de navigation, cliquer sur **Acquire (Acquérir)**.
3. Cliquer sur **Acquire (Acquérir) > Stop Sample (Arrêter Échantillon)**.

   La file d'attente s'arrête après le balayage en et quand l'échantillon sélectionné se termine. La fenêtre de l'état de l'échantillon dans le Gestionnaire de file d'attente (Local) passe à Terminé et tous les autres échantillons suivant dans la file d'attente sont en attente.
4. Pour poursuivre le traitement par lots, cliquer sur **Acquire (Acquérir) > Start Sample (Démarrer échantillon)**.

Conseils pour l'Éditeur de lots et de méthode d'acquisition

Tableau 5-1 Conseils

Pour ce faire ...	... faire ce qui suit
Pour modifier toutes les valeurs d'une colonne simultanément	Cliquer sur un en-tête de colonne, puis cliquer sur le bouton droit de la souris. Dans le menu, utilisez la fonction d'auto-incrémentation et les commandes Remplir vers le bas pour modifier les valeurs de la colonne. Cela fonctionne également pour plusieurs cellules de la même colonne.
Pour modifier une méthode d'acquisition existante	Dans la liste, sélectionnez la méthode puis cliquez sur Method Editor (Éditeur de méthode). Pour créer une nouvelle méthode d'acquisition, dans la liste, sélectionnez Aucun et cliquez sur Method Editor (Éditeur de méthode). Seuls les utilisateurs expérimentés doivent utiliser cette fonction. Ne pas utiliser cette fonction si l'option Use Multiple Methods (Utiliser Méthodes Multiples est utilisée).
Pour appliquer une méthode de quantification créé précédemment	Sélectionnez la méthode de quantification du menu.
Pour sélectionner plus d'un flacon ou fioles à un moment	Maintenez la touche Maj enfoncée, puis cliquez sur le premier et le dernier flacon ou fiole dans la plage.

Menu contextuel de l'Éditeur de lot

Cliquez avec le bouton droit dans le tableau de résultats pour accéder aux options suivantes.

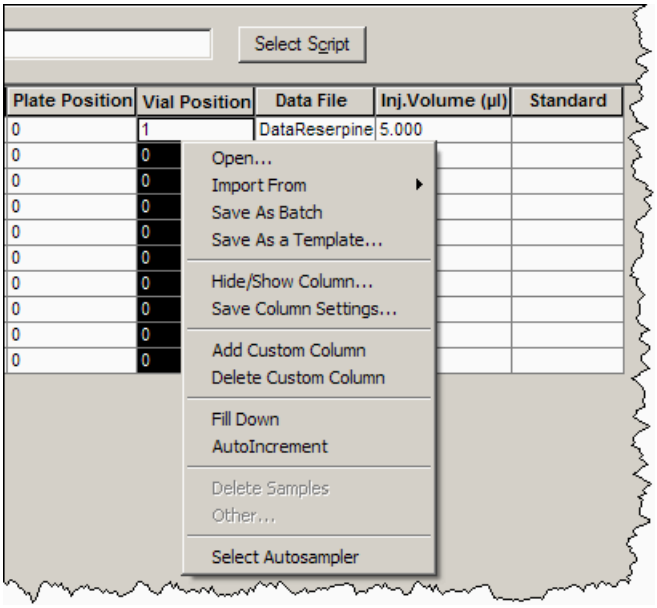


Figure 5-5 Menu contextuel Lot

Menu	Fonction
Ouvrir	Ouvre un fichier de lots.
Importer à partir de	Importe un fichier.
Enregistrer sous forme de lot	Enregistre le lot.
Save As a template (Enregistrer comme modèle)	Enregistre le lot comme un modèle. Utilisé avec la fonction de Vue Express.
Masquer/Afficher la colonne	Masque ou affiche une colonne.
Enregistrer les paramètres de colonne	Enregistre les paramètres de colonne par lot.
Ajouter Colonne personnalisée	Ajoute une colonne personnalisée.
Supprimer Colonne personnalisée	Supprime une colonne personnalisée.
Remplir vers le bas	Remplit les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
Auto Incrémentation	Remplit les données automatiquement dans les cellules sélectionnées.
Supprimer des échantillons	Supprime la ligne sélectionnée.

Figure 5-5 Menu contextuel Lot (Suite)

Menu	Fonction
Sélectionner Auto-échantillonneur	Sélectionne un auto-échantillonneur.

États de la file d'attente et l'état du périphérique

Le gestionnaire de file d'attente montre la file d'attente, les lots et l'état de l'échantillon. Les informations détaillées d'un échantillon particulier dans la file d'attente peuvent également être consultées.

Statut de la file d'attente.

L'état actuel de la file d'attente est indiqué dans le serveur de file d'attente.

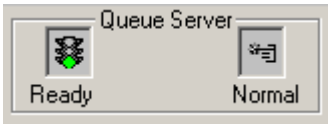


Figure 5-6 Serveur de file d'attente indiquant mode Normal

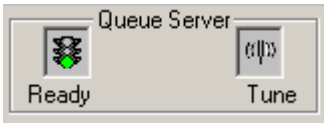


Figure 5-7 Serveur de file d'attente indiquant mode Réglage

La première icône Figure 5-6 montre l'état de la file d'attente. La deuxième icône indique si la file d'attente est en mode réglage (tuning) ou en mode Normal (pour l'exécution des échantillons). Tableau 5-2 Indique les différents états de la file d'attente.

Tableau 5-2 Statut de la file d'attente .

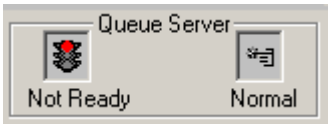
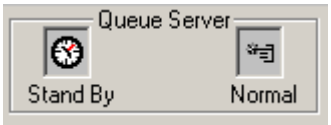
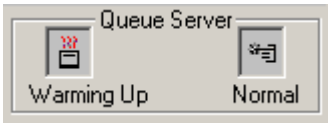
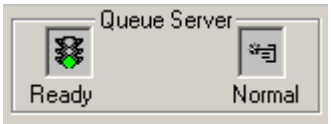
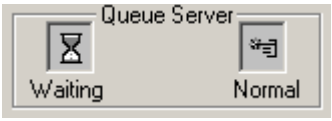
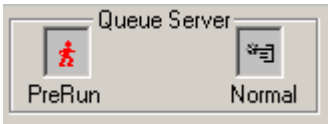
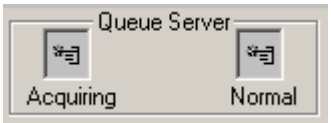
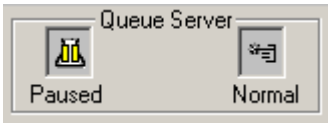
Icônes	Phase	Définition
	Pas prêt	À la phase Non prêt, le profil matériel est désactivé et la file d'attente n'accepte aucun des échantillons soumis.
	En attente	À la phase En attente, le profil matériel a été activé, mais tous les périphériques sont au ralenti. Les pompes ne sont pas en route et le gaz est coupé.

Tableau 5-2 Statut de la file d'attente (Suite).

Icônes	Phase	Définition
	Préchauffage	À la phase Préchauffage, l'instrumentation et les périphériques sont couplées, les colonnes sont conditionnées, l'aiguille de l'auto-échantillonneur est lavée, et le four à colonnes atteint sa température. La période d'équilibrage est sélectionnée par l'opérateur. À partir de cette phase, le système peut passer à État Prêt.
	Prêt	En Prêt, le système est prêt à commencer l'exécution des échantillons et les périphériques ont été équilibrés et sont prêts à marcher. À cette phase, la file d'attente peut recevoir des échantillons qui seront traités après leur soumission acceptée.
	En attente	À la phase En attente, le système va automatiquement lancer l'acquisition lorsque l'échantillon suivant est présenté.
	Pré exécuter	À la phase Préexécuter, la méthode est téléchargée pour chaque périphérique avec un rééquilibrage. Cette phase a lieu avant l'acquisition de chaque échantillon dans un lot.
	Acquisition	À la phase Acquisition, la méthode est exécutée et l'acquisition de données se fait.
	En pause	À la phase En pause, l'instrumentation a été mis en pause pendant l'acquisition.

Vue Instrumentation et icônes du statut des périphériques

Les icônes représentant l'instrumentation et chaque périphérique dans la configuration active apparaissent sur la barre d'état en bas à droite de la fenêtre. L'utilisateur peut afficher le statut détaillé d'une pompe LC pour vérifier si la pression de celle-ci est la plus appropriée ou afficher le statut détaillé de l'instrumentation pour vérifier la température de la source d'ions.

- Sur la barre d'état, double-cliquez sur l'icône pour le périphérique ou l'instrumentation.

  La boite de dialogue sur le statut de l'instrumentation s'ouvre

Tableau 5-3 Instrument et Statut du périphérique (affichant l'icône de l'instrumentation)

Statut	Icône	Couleur d'arrière-plan	Description
Inoccupé		Vert ou jaune	Le périphérique n'est pas en fonction. Si la couleur d'arrière-plan est jaune, le périphérique doit être équilibrée avant qu'il ne soit prêt à fonctionner. Si la couleur d'arrière-plan est verte, le périphérique est prêt à fonctionner.
Équilibrage		Vert ou jaune	Le périphérique est équilibrer.
En attente		Vert	Le périphérique est en attente d'un ordre du logiciel, à partir d'un autre périphérique ou de quelque action de la part de l'opérateur.
En fonction		Vert	Le périphérique est en fonction.
Abandon		Vert	Le périphérique abandonne une exécution.
Téléchargement		Vert	Une méthode est en cours de transfert vers le périphérique.
Prêt		Vert	Le périphérique n'est pas en fonctionnement mais est prêt.
Erreur		Rouge	Le périphérique a rencontré une erreur qui doit faire l'objet d'étude.

Remarque : Pour chaque statut, la couleur d'arrière-plan peut également être rouge. Ce qui signifie que le périphérique a rencontré une erreur au cours de cette phase.

Menu contextuel File d'attente

Cliquez avec le bouton droit dans le tableau File d'attente pour accéder aux options suivantes.

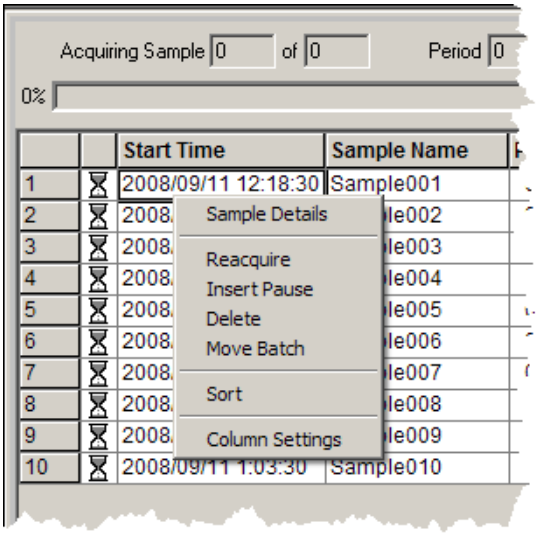


Figure 5-8 Menu contextuel Gestion File d'attente

Menu	Fonction
Détails sur l'échantillon	Ouvre la boite de dialogue Détails sur l'échantillon
Réacquérir	Acquiert un nouvel échantillon.
Insérer pause	Insère une pause, en secondes, entre deux échantillons.
Supprimer	Supprime le lot ou les échantillons sélectionnés.
Déplacer le lot	Déplace le lot dans la file d'attente.
Trier	Trie selon la colonne présélectionner.
Paramètres colonne	Modifie les paramètres de colonne.

Icône Référence rapide : Mode Acquisition

Tableau 5-4 Icônes du mode Acquisition

Icône	Nom	Fonction
	Afficher la file d'attente	Afficher la file d'attente d'échantillons.
	File d'attente Instrumentation	Afficher un poste d'instrumentation à distance.
	Statut de l'instrumentation à distance	Afficher le statut d'une instrumentation à distance.
	Démarrer échantillon	Démarre l'échantillon dans la file d'attente.
	Arrêter échantillons	Arrête l'échantillon dans la file d'attente.

Tableau 5-4 Icônes du mode Acquisition (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Abandonne échantillon	Interrompt une acquisition d'échantillons au milieu de son traitement.
	Arrêt de file d'attente	Arrête la file d'attente avant d'avoir terminé le traitement de tous les échantillons.
	Pause échantillon immédiate	Insère une pause dans la file d'attente.
	Insérer Pause avant Sélection d'échantillon	Insère une pause avant un échantillon spécifique.
	Continuer échantillon	Continue l'acquisition de l'échantillon.
	Prochaine Période	Démarre une nouvelle période.
	Prolonger la période	Étend la période en cours.
	Échantillon suivant	Arrête l'acquisition l'échantillon courant pour commencer l'acquisition de l'échantillon suivant.
	Équilibrer	Cliquer pour sélectionner la méthode à utiliser pour équilibrer les périphériques. Cette méthode doit être la même que la méthode utilisée avec le premier échantillon dans la file d'attente.
	Mise en veille	Met l'instrumentation en mode de veille.
	Prêt	Met l'instrumentation en mode Prêt
	Réserver Instrumentation pour réglage	Réserve l'instrumentation pour le réglage et l'étalonnage.
	Assistant Méthode IDA	Démarre l'assistant de la méthode IDA.

L'analyse et le traitement de données quantitatives

6

Utilisez les exemples de fichiers installés dans le dossier Exemple pour apprendre à afficher et analyser les données avec les outils d'analyse et de traitement habituels. Pour plus d'informations sur les rubriques suivantes, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

- Étiquetage des graphiques
- Superposition et addition des spectres ou des chromatogrammes
- Exécution des soustractions en arrière-plan
- Algorithmes de lissage
- Travailler avec des données lissées
- Travailler avec des données centroïdes
- Travailler avec un tracé des contours
- Travailler avec l'outil d'interprétation de la fragmentation
- Utilisation une bibliothèque de bases de données et d'enregistrements

Ouvrir les fichiers de données

Condition préalable : Sélectionner Exemple

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.
2. Dans **Data Files (Fichier de données),** double-cliquer sur**Triple Quad** .
3. Sélectionner **QuanData.wiff** .
4. Dans **Samples (Échantillons),** sélectionner l'échantillon AP13-020
5. Cliquer sur**OK**.

   Les données acquises à partir de l'échantillon sont diffusées. Si les données sont encore en cours d'acquisition, le spectre de masse, DAD/UV trace, et TIC continueront de mettre à jour en automatique.

Conseil !Pour désactiver la mise à jour automatique sur le spectre de masse, cliquez avec le bouton droit de la souris sur le spectre de masse, puis cliquez sur Afficher **le dernier balayage**. Si il y a une marque à côté d'Afficher **le dernier balayage**, alors le spectre se met à jour en temps réel.

Naviguer entre les échantillons dans un fichier de données

Condition préalable : Sélectionner Exemple

Tableau 6-9 Affiche les icônes de navigation utilisées dans cette procédure. Si des échantillons ont été enregistrées dans des fichiers séparés, ouvrir chaque fichier individuellement.

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.
2. Dans **Fichier de données,** double-cliquer sur **Triple Quad** .
3. Sélectionner **QuanData.wiff** .
4. Pour passer à l'échantillon suivant dans le fichier de données, cliquez sur l'icône avec la flèche droite.
5. Pour passer à un échantillon non séquentiel, cliquez sur l'icône avec la flèche droite.
6. Dans la boite de dialogue **Select Sample (Sélectionner échantillon)**, dans **Sample(Échantillon)**, sélectionner l'échantillon.
7. Pour passer à l'échantillon précédent dans le fichier de données, cliquez sur l'icône avec la flèche gauche.

Affichage de Conditions Expérimentales

Les conditions expérimentales utilisées pour recueillir les données sont stockées dans le fichier de données avec les résultats. Les informations contiennent des détails sur la méthode d'acquisition utilisée: méthode d'acquisition MS (nombre de périodes, expériences et cycles) y compris les méthodes de paramètres de l'instrumentation et de l'appareillage HPLC (débit de pompe LC). En plus, elles contiennent aussi les tableaux d'étalonnage de résolution de masse utilisés pour l'acquisition d'échantillons.Tableau 6-1 Affiche les fonctionnalités du logiciel disponibles lorsque l'utilisateur affiche les informations de fichier.

Remarque : Si les données sont acquises par plus d'un échantillon dans le même fichier .wiff, le volet des informations sur le fichier ne sera pas actualisé automatiquement lorsque l'utilisateur fait défiler les échantillons. Fermez le volet informations, puis rouvrez-le pour afficher les détails de l'échantillon suivant dans le fichier .wiff.

- Cliquez sur **Explore (Explorer)** > **Show(Afficher)** > **Show File Information (Afficher Information Fichier)**.

  Le volet des informations sur le fichier s'ouvre sous le graphique.

Conseil !Pour créer une méthode d'acquisition à partir du volet d'informations sur le fichier, cliquez avec le bouton droit sur le volet d'informations, puis cliquez sur Enregistrer **Méthode de l'Acquisition.**

Tableau 6-1 Menu contextuel bouton droit pour Show File Information (afficher le fichier volet d'informations)

Menu	Fonction
Copy	Copie les données sélectionnées.
Paste	Colle les données.
Select All	Sélectionne toutes les données dans le volet.
Save To File	Enregistre les données dans un fichier .rtf.
Font	Modifie la police.

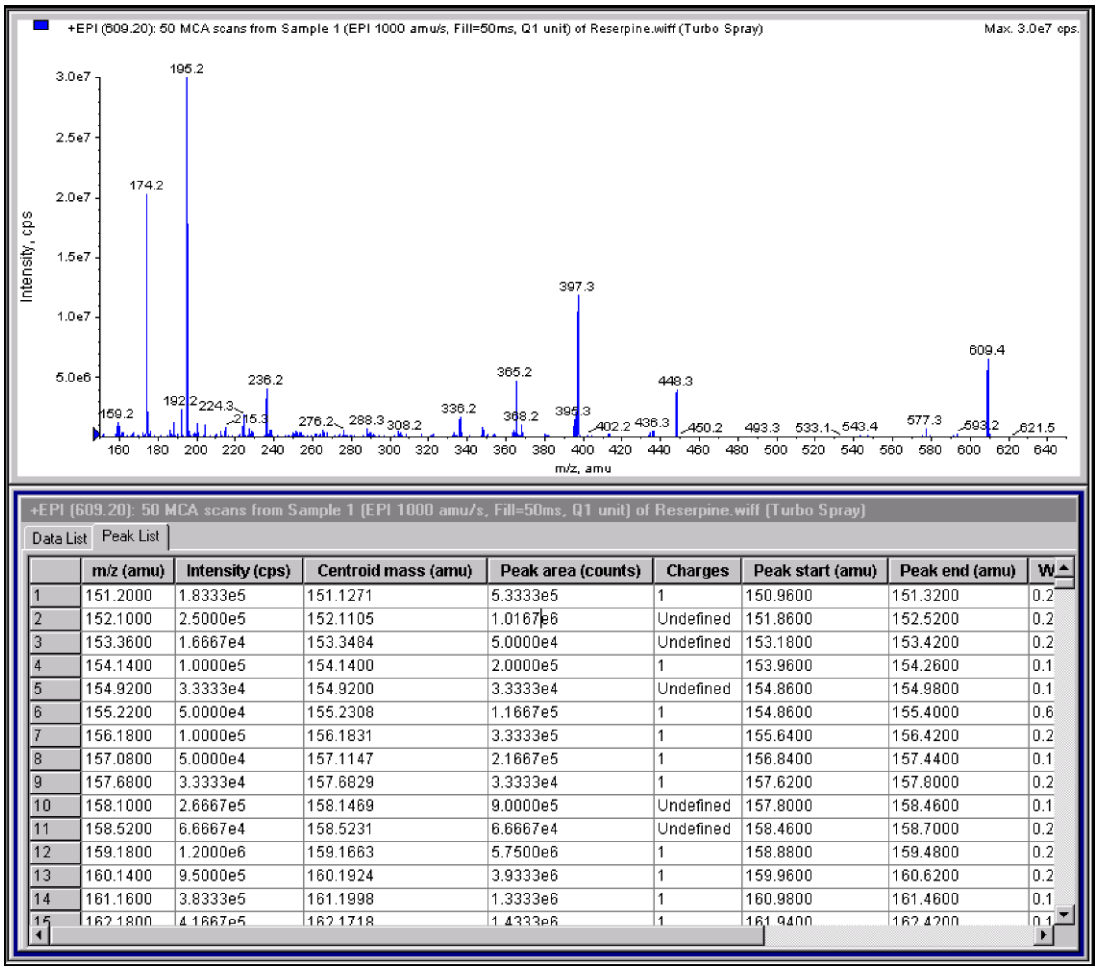
Tableau 6-1 Menu contextuel bouton droit pour Show File Information (afficher le fichier volet d'informations) (Suite)

Menu	Fonction
Save Acquistion Method (Enregistrer Méthode d'acquisition)	Enregistre la méthode d'acquisition comme fichier .dam.
Enregistrer méthode d'acquisition à composé DB	Ouvre la boite de dialogue Préciser les information sur les composés. Sélectionner l'identité et les poids moléculaires pour être enregistrées dans la base de données des composés.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre

Afficher les données dans des tableaux

- Avec un fichier de données ouvert, cliquer sur **Explore (Explorer)** > **Show (Afficher)** > **Show List Data (Afficher données)**.

  Les données sont affichées dans une fenêtre sous le graphique.


+EPI (609.20): 50 MCA scans from Sample 1 (EPI 1000 amu/s, Fill=50ms, Q1 unit) of Reserpine.wiff (Turbo Spray)
Max. 3.0e7 cps.
Intensity, cps
m/z, amu
+EPI (609.20): 50 MCA scans from Sample 1 (EPI 1000 amu/s, Fill=50ms, Q1 unit) of Reserpine.wiff (Turbo Spray)
Data List
Peak List

	m/z (amu)	Intensity (cps)	Centroid mass (amu)	Peak area (counts)	Charges	Peak start (amu)	Peak end (amu)	W
1	151.2000	1.8333e5	151.1271	5.3333e5	1	150.9600	151.3200	0.2
2	152.1000	2.5000e5	152.1105	1.0167e6	Undefined	151.8600	152.5200	0.2
3	153.3600	1.6667e4	153.3484	5.0000e4	Undefined	153.1800	153.4200	0.2
4	154.1400	1.0000e5	154.1400	2.0000e5	1	153.9600	154.2600	0.1
5	154.9200	3.3333e4	154.9200	3.3333e4	Undefined	154.8600	154.9800	0.1
6	155.2200	5.0000e4	155.2308	1.1667e5	1	154.8600	155.4000	0.6
7	156.1800	1.0000e5	156.1831	3.3333e5	1	155.6400	156.4200	0.2
8	157.0800	5.0000e4	157.1147	2.1667e5	1	156.8400	157.4400	0.1
9	157.6800	3.3333e4	157.6829	3.3333e4	1	157.6200	157.8000	0.2
10	158.1000	2.6667e5	158.1469	9.0000e5	Undefined	157.8000	158.4600	0.1
11	158.5200	6.6667e4	158.5231	6.6667e4	Undefined	158.4600	158.7000	0.2
12	159.1800	1.2000e6	159.1663	5.7500e6	1	158.8800	159.4800	0.2
13	160.1400	9.5000e5	160.1924	3.9333e6	1	159.9600	160.6200	0.2
14	161.1600	3.8333e5	161.1998	1.3333e6	1	160.9800	161.4600	0.1
15	162.1800	4.1667e5	162.1718	1.4333e6	1	161.9400	162.4200	0.1

Tableau 6-2 Menu contextuel pour l'onglet de la liste des crêtes spectrales

Menu	Fonction
Options de colonne	Ouvre la liste Sélectionner colonnes pour la boite de dialogue des crêtes.
Enregistrer sous forme de texte	Enregistre les données dans un fichier texte.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre

Tableau 6-3 Menu contextuel pour l'onglet de la liste des crêtes chromatographique

Menu	Fonction
Paramètres Analyst classique	Ouvre la boite de dialogue Analyst classique
Paramètres IntelliQuan	Ouvre le dialogue Intelliquan.
Enregistrer sous forme de texte	Enregistre les données dans un fichier texte.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre

Afficher données ADC

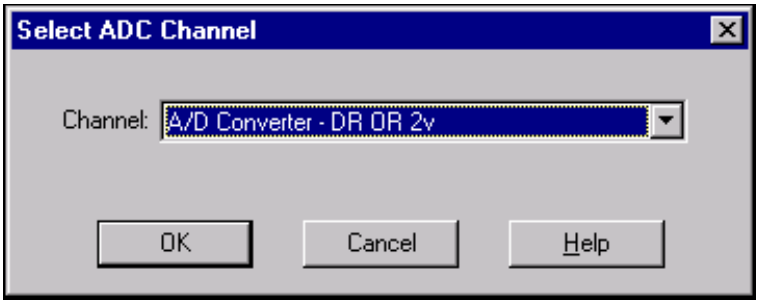
les données CAN (convertisseur analogique/numérique) données sont acquises par un détecteur secondaire (par exemple à partir d'un détecteur UV au travers d'une carte CAN), et sont utiles pour la comparaison avec les données du spectromètre de masse. Pour obtenir des données CAN disponibles, acquérir simultanément les données et celles du spectromètre de masse et enregistrez-les dans le même fichier.

Condition préalable : Sélectionner Exemple

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.
2. Dans **Data Files (Fichiers de données)**, double-cliquer sur **Devices (Périphériques)** , puis sur **Adc16chan.wiff** .
3. Dans **Samples (Échantillon),** sélectionner un échantillon.
4. Cliquer sur**OK**.
5. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show ADC Data (Afficher Données CAN)**.

   La boite de dialogue de la chaine CAN choisie s'ouvre.



6. Dans **Channel (Chaine),** sélectionner une chaine.
7. Cliquer sur **OK**.

   Les données du CAN s'ouvrent dans un nouveau volet sous le volet actif.

Afficher données quantitatives de base

1. Dans l'onglet Peak List (Liste des crêtes), cliquer avec le bouton droit et sélectionner **Show Peaks in Graph (Afficher Crêtes sur Graphique).**

   Les crêtes apparaissent en deux couleurs.
2. Pour modifier les réglages de l'algorithme de recherche de crêtes, cliquer sur le bouton droit, puis sélectionner soit **Analyst Classic parameters (Paramètres de l'Analyst classique)** soit **Parameters Intelliquan** , qui est toujours en activité.
3. Pour enlever les crêtes colorées, cliquer avec le bouton droit dans l'onglet **Peak List (Liste des crêtes)**, puis désélectionner **Afficher Crêtes sur Graphique**.

Chromatogrammes

Tableau 6-4 Chromatogrammes

Types de chromatogrammes	Objectif
Chromatogramme en courant ionique total (TIC)	Un affichage chromatographique généré par le tracé de l'intensité de tous les ions dans un balayage face au temps ou au chiffre de balayage. Lorsqu'un fichier de données est ouvert, il est préréglé pour apparaître comme un TIC. Si l'expérience contient un seul balayage, il est représenté comme un spectre. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, reportez-vous à Tableau 6-8 *Options de graphique* à la page 90. Si la case MCA est sélectionnée au cours de l'acquisition d'un fichier de données, alors le fichier s'ouvre au spectre de masse. Si la case MCA case n'est pas sélectionnée, alors le fichier de données s'ouvre avec le TIC

Tableau 6-4 Chromatogrammes

Types de chromatogrammes	Objectif
Chromatogramme en ion extrait (XIC)	Un chromatogramme d'ion créé en prenant les valeurs d'intensité à la valeur de la masse simple, discrète, ou une gamme de masse, à partir d'une série de balayages spectraux d'une série de masses. Il indique le comportement d'une masse donnée, ou sa plage de masse, en fonction du temps.
Chromatogramme des crêtes de base (BPC)	Tracé chromatographique qui montre l'intensité de l'ion le plus intense dans un balayage par rapport au temps ou chiffre du balayage.
Chromatogramme de longueur d'onde total (TWC)	Un affichage chromatographique créé par l'addition de toutes les valeurs d'absorbance dans la gamme de longueurs d'onde acquises, puis du tracé des valeurs face au temps. Il se compose de la somme des absorbances de tous les ions dans un balayage tracé face au temps dans une fenêtre chromatographique.
Chromatogramme de longueur d'onde extraites (XWC)	Un sous-ensemble de TWC. Un XWC montre la valeur de l'absorbance pour une longueur d'onde unique ou la somme des absorbances pour une gamme de longueurs d'onde.
Détecteurs à barettes de diodes (DAD)	Un détecteur d'UV qui surveille le spectre d'absorption des composés à élution à une ou plusieurs longueurs d'onde.

Montrer les TIC d'un spectre

Condition préalable : Sélectionner Exemple

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.
2. Dans **Data Files (Fichiers de données)**, double-cliquer sur **LIT**, puis sur **Réserpine.wiff**.
3. Cliquer sur**OK**.
4. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show TIC(Afficher TIC)**.

   Le TIC s'ouvre dans un nouveau volet.

Conseil !Cliquer avec le bouton droit à l'intérieur d'un volet contenant un spectre, puis cliquer sur **Show TIC (Afficher TIC)**.

Afficher un spectre d'un TIC

1. Dans un volet contenant un TIC, sélectionner une gamme.
2. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show Spectrum (Afficher Spectre)**.

   Le spectre s'ouvre dans un nouveau volet.

Conseil !Double-cliquez sur le volet TIC à un moment donné pour afficher le spectre.

Générer XIC

L'utilisateur peut générer un XIC uniquement à partir des chromatogrames ou spectres d'une seule période, d'une seule expérience. Pour obtenir un XIC des données de période ou expériences multiples séparer les données dans différents volets en cliquant sur le triangle sous l'abscisse x Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, reportez-vous à Tableau 6-8 *Options de graphique* à la page 90.

Il existe plusieurs méthodes d'extraction des ions pour générer un XIC, en fonction des données chromatographiques ou spectrales utilisées.Tableau 6-5 Contient un résumé des méthodes qui peuvent être utilisées avec des chromatogrammes et des spectres.

Tableau 6-5 Récapitulatif des méthodes pour générer XIC

Méthode	Utiliser avec un chromatogramme	Utiliser avec un spectre	Extraction
Gamme sélectionnée	Non	Oui	La méthode sélectionnée extrait les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre.
Maximum	Non	Oui	La méthode maximum extraits les ions d'une zone sélectionnée dans un spectre à l'aide de la crête la plus intense dans la zone sélectionnée. Cela crée un XIC en utilisant la masse maximale de la gamme spectrale sélectionnée.
Masses de crêtes de base	Oui	Non	La méthode des masses de crêtes de base peut être utilisée uniquement avec BPC (chromatogrammes de crêtes de base). Utiliser la commande des masses de crêtes de base pour extraire des résultats sur les ions dans un XIC avec un tracé de couleur différente pour chaque masse. Si la sélection inclut plusieurs crêtes, le XIC trouvé aura un nombre égal de tracés colorées représentant chaque masse.
Masses spécifiées	Oui	Oui	La méthode des masses spécifiées extrait des ions de tout type de spectre ou chromatogramme. Sélectionnez jusqu'à dix démarrages et arrêts pour lesquelles un XIC sera généré

Pour générer un XIC utilisant une gamme sélectionnée

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.

2. Dans **Data Files (Fichiers de données)**, double-cliquer sur **LIT**, puis sur**Réserpine.wiff**.
3. Cliquer sur**OK**.
4. Pour sélectionner une plage dans le volet, cliquer et maintenir le bouton gauche de la souris au début de la plage, puis faites glisser le curseur vers le point d'arrêt et le relâcher.

   La sélection est mise en surbrillance en bleu.
5. Cliquez sur **Explorer > Extraire Ions > Utiliser Plage**.

   Un XIC de la sélection spécifiée s'ouvre dans un volet sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Pour générer un XIC utilisant une crête ,maximum

1. Dans la barre de navigation, sous **Explore (Explorer)**, double-cliquer sur **Open data File (Dossier d'ouverture des données)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.
2. Dans **Data Files (Fichiers de données)**, double-cliquer sur **LIT**, puis sur**Réserpine.wiff**.
3. Cliquer sur**OK**.
4. Sélectionner une plage

   La sélection est mise en surbrillance en bleu.
5. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Extract Ions (Extraire Ions)** > **Use Maximum (Utiliser Maximum)**.

   Un XIC de la crête maximum spécifiée s'ouvre sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Pour générer un XIC utilisant les masse de crêtes de base

1. Dans un BPC, sélectionner la crête à partir de laquelle il faut extraire des ions.

   La sélection est mise en surbrillance en bleu.
2. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Extract Ions (Extraire Ions)** >**Use Base Peak Masses (Utiliser Masses de crêtes de base)**.

   Un XIC de la sélection spécifiée s'ouvre sous le volet du spectre. L'information de l'expérience en haut du volet contient la gamme de masse et l'intensité maximale comptée par seconde.

Pour extraire des ions en sélectionnant masses

1. Ouvrir un spectre ou un chromatogramme.
2. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Extract Ions (Extraire Ions)** > **Use Dialog (Utiliser boite de dialogue)**.

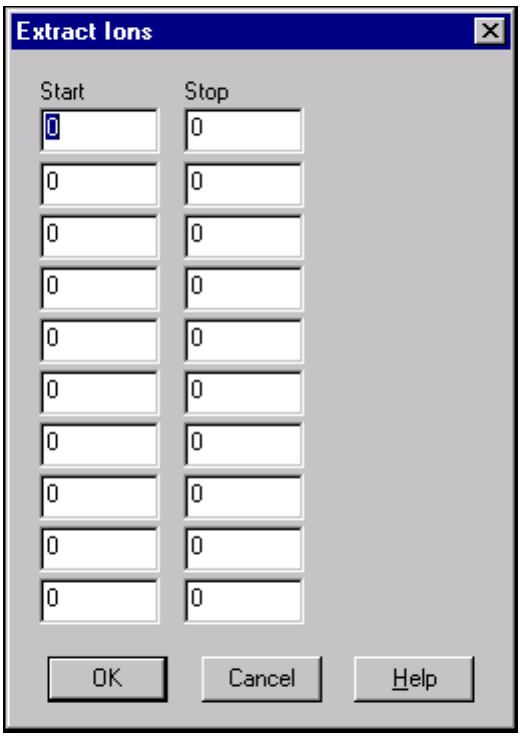


Figure 6-1 Boite de dialogue Extraction d'ions

3. Entrer les valeurs pour chaque XIC à créer. Si une valeur d'arrêt n'est pas saisie, alors la plage est définie par la valeur de démarrage.
   - Dans le champ **Start (Début)**, entrer la valeur de départ (valeur la plus basse) pour la gamme de masse.
   - Dans le champ **Stop (Arrêt)**, entrer la valeur d'arrêt (valeur la plus haute) pour la gamme de masse.
4. Cliquer sur**OK**.

   Un XIC de la sélection s'ouvre sous le volet du chromatogramme L'information de l'expérience en haut du volet contient les masses et l'intensité maximale comptée par seconde.

Générer BPC

BPC peut être créé uniquement à partir des données de période et expérience unique. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, reportez-vous à Tableau 6-8 *Options de graphique* à la page 90.

1. Sélectionner une zone à l'intérieur d'un TIC.

   La sélection est mise en surbrillance en bleu.
2. Cliquer sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show Base Peak Chromatogram (Afficher Chromatogramme des crêtes de base)**.

   Les sélections sont affichées dans les champs Heure de début et Heure de fin.

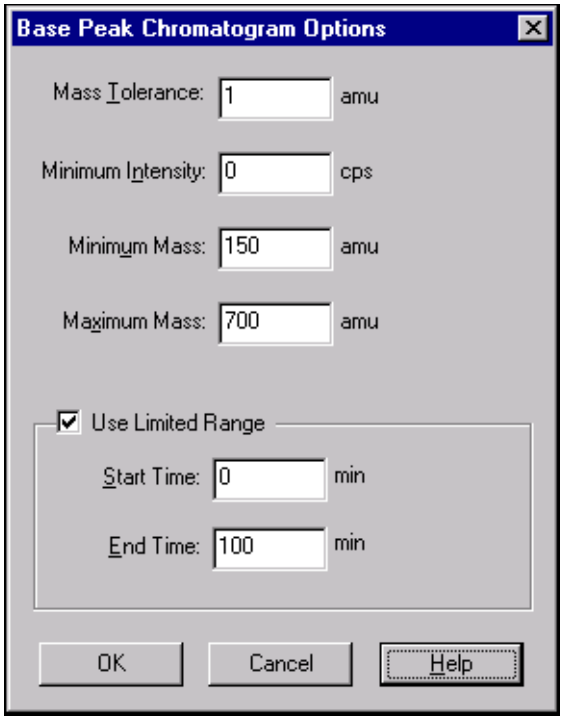


Figure 6-2 Boite de dialogue Options Chromatogramme de crêtes de base

3. Dans le champ **Mass Tolerance (Tolérance de masse)**, taper la valeur de la plage de masse à utiliser pour trouver une crête. Le logiciel détecte la crête en utilisant une valeur de deux fois celle de la plage entrée (± la valeur de la masse).
4. Dans le champ **Minimum Intensity (Valeur minimale d'intensité),** entrer l'intensité au-dessous de laquelle les crêtes seront ignorées par l'algorithme.
5. Dans le champ**Minimum Mass (Masse minimale)**, entrer la masse qui détermine le début de la plage du balayage.
6. Dans le champ**Maximum Mass (Masse maximale)**, entrer la masse qui détermine la fin de la plage du balayage.
7. Pour définir les heures de début et de fin, sélectionner la case à cocher **Use Limited range (Utiliser une plage limitée)** et procédez comme suit :
   - Dans le champ**Start Time (Heure de début**) entrer l'heure de commencement de l'expérience.la masse qui détermine la fin de la plage du balayage.
   - Dans le champ**End Time (heure de fin)**, entrer l'heure de fin d'expérience.
8. Cliquer sur**OK**.

   Le BPC est généré dans un nouveau volet.

Générer XWC

L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plagesd'un spectre DADpour générer le XWC. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, reportez-vous à Tableau 6-8 *Options de graphique* à la page 90.

1. Ouvrir un fichier de données qui contient un spectre DAD
2. N'importe où dans la fenêtre, cliquer avec le bouton droit de la souris, puis cliquez sur **Extract Wavelengths (Extraire longueurs d'ondes).**

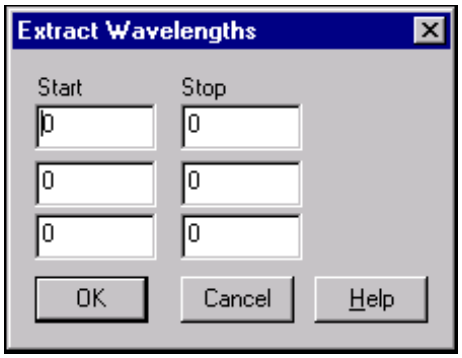


Figure 6-3 Boite de dialogue Extraction de longueurs d'ondes

3. Entrer les valeur de démarrage et de fin
4. Cliquer sur **OK**.

   Le XWC s'ouvre dans un volet en-dessous du spectre DAD.

Afficher données DAD

L'utilisateur peut afficher les données DAD dans un chromatogramme ou un spectre, comme celles d'un spectromètre de masse.

1. Ouvrir un fichier de données contenant les données acquises avec un DAD.
2. Le TWC, comme pour un TIC, s'ouvre dans un volet sous le TIC.
3. Dans le volet TWC, cliquer sur un point pour sélectionner un seul point à la fois ou mettre en évidence une zone du spectre pour sélectionner une plage de temps.
4. Cliquez sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show DAD Spectrum (Afficher le spectre DAD)**.

   Le spectre DAD s'ouvre dans un volet sous le TWC. L'ordonnée y affiche l'absorbance et l'abscisse x la longueur d'onde.

Conseil !Si le volet avec le TWC est fermée, cliquez sur un point quelconque dans le TWC pour l'ouvrir à nouveau. Cliquez sur **Explore (Explorer)** > **Show (Afficher)** > **Show DAD TWC(Afficher DAD TWC)**.

Générer TWC

Le TWC indique le nombre total d'absorbances (mAU) sur l'axe des y avec le temps sur l'axe des x. Pour plus d'informations sur l'utilisation des icônes disponibles, reportez-vous à Tableau 6-8 *Options de graphique* à la page 90.

1. Ouvrir un fichier de données qui contient un spectre DAD
2. Cliquez sur **Explore (Explorer) > Show (Afficher) > Show DAD TWC (Afficher DAD TWC)**.

Le TWC s'ouvre dans un volet sous le spectre DAD.

Conseil !Cliquer avec le bouton droit à l'intérieur du volet contenant le spectre DAD, puis cliquer sur Afficher DAD TIC

Ajuster le seuil

Le seuil est une ligne invisible tirée parallèlement à l'axe des x d'un graphique qui définit une limite au-dessous de laquelle le logiciel n'inclura pas les crêtes dans un spectre. La ligne a une commande, représentée par un triangle bleu sur la gauche de l'axe des y. Cliquez sur le triangle bleu pour afficher une ligne pointillée que représente le seuil. Le seuil peut être relevé ou abaissé, mais le changement de la valeur du seuil ne modifie pas les données. Le logiciel ne marquera pas les crêtes dans la zone sous le seuil.

1. Ouvrir un fichier de données.
2. Ajuster le seuil en utilisant en suivant l'une de ces étapes :
   - Pour relever le seuil, faites glisser vers le haut le triangle bleu de l'axe des y. Pour baisser le seuil, faites glisser vers le bas le triangle bleu de l'axe des y.
   - Cliquez sur **Explore (Explorer) > Set Threshold (Définir le seuil)**. Dans **Thresold (Options Seuil)** qui s'ouvre, saisissez la valeur de seuil.
   - Cliquez sur **Explore (Explorer) > Thresold (Seuil)**.

   Le graphique se met à jour pour afficher le nouveau seuil. L'étiquetage de crêtes et leur liste sont également mis à jour.

Conseil !Pour afficher la valeur de seuil actuelle, déplacez le pointeur sur sa commande.

Tableau 6-6 Menu contextuel de Volet de chromatogramme

Menu	Fonction
Données de la liste	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
Afficher le spectre	Génère un nouveau volet.
Afficher tracé de contour	Affiche un tracé en couleur codifié d'un ensemble de données dans lesquels la couleur représente l'intensité des données à ce point. Seuls certains modes MS sont pris en charge.
Extraction d'ions	Extrait un ion spécifique ou un ensemble d'ions d'une fenêtre sélectionnée et alors génère un nouveau volet contenant un chromatographe pour les ions spécifiques.
Afficher Chromatogramme de crêtes de base	Génère un nouveau volet contenant un chromatogramme de crête de base.
Afficher données ADC	Génère un nouveau volet contenant les trace de données UV si acquises.
Assistant arithmétique spectrale	Ouvre l'assistant pour l'arithmétique spectrale.

Tableau 6-6 Menu contextuel de Volet de chromatogramme (Suite)

Menu	Fonction
Enregistrer dans un fichier texte	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Excel ou d'autres programmes.
Enregistrer Exploration Historique	Le dossier Exploration Historique enregistre les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelé Options de traitement, lorsqu'un fichier .wiff est traitée en mode Exploration. L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension EPH(Exploration Historique du traitement).
Ajouter une légende	Ajoute une légende au point du curseur dans le volet.
Ajouter texte utilisateur	Ajoute une zone de texte à la position du curseur de la souris.
Définir plage à soustraire	Définit la plage à soustraire dans le volet.
Effacer plage à soustraire	Efface la plage à soustraire dans le volet.
Plage à soustraire verrouillée	Verrouille ou déverrouille la plage sélectionnée. Si les plages à soustraire sont pas verrouillées alors chacune peut être déplacée indépendamment. Les plages à soustraire sont préréglées verrouillées.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.

Tableau 6-7 Menu contextuel de Spectra Panes (Fenêtres spectrales)

Menu	Fonction
Données de la liste	Donne les points des données et intègre les chromatogrammes.
Afficher TIC	Génère un nouveau volet contenant les TIC.
Extraction d'ions	Extrait un ion spécifique ou un ensemble d'ions d'une fenêtre sélectionnée et alors génère un nouveau volet contenant un chromatographe pour les ions spécifiques.
Enregistrer dans un fichier texte	Génère un fichier texte du volet, qui peut être ouvert dans Excel ou d'autres programmes.
Enregistrer Exploration Historique	Le dossier Exploration Historique enregistre les modifications apportées aux paramètres de traitement, également appelé Options de traitement, lorsqu'un fichier .wiff est traitée en mode Exploration. L'historique du traitement est stocké dans un fichier avec une extension EPH(Exploration Historique du traitement).
Ajouter une légende	Ajoute une légende au point du curseur dans le volet.
Ajouter texte utilisateur	Ajoute une zone de texte à la position du curseur de la souris.
Affiche le dernier balayage	Affiche une analyse avant la sélection.
Sélection des crêtes pour étiquette	Dans cette boîte de dialogue, sélectionnez les paramètres pour réduire l'étiquetage des crêtes.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre sélectionnée.
Ajouter un enregistrement	Ajoute des enregistrements et des données connexes des composés incluant les spectrales à la bibliothèque. Un spectre actif est requis pour effectuer cette tâche.

Tableau 6-7 Menu contextuel de Spectra Panes (Fenêtres spectrales) (Suite)

Menu	Fonction
Rechercher dans la bibliothèque	Recherche dans la bibliothèque sans contrainte ou avec contraintes précédemment enregistrées.
Recherche avec contraintes	Recherches à l'aide de la boite de dialogue Contraintes de recherche.

Traitement des données

Des données graphiques peuvent être traitées de nombreuses façons. Cette section fournit des informations et des procédures pour utiliser certains des outils les plus couramment utilisés.

L'utilisateur peut effectuer un zoom avant sur une partie d'un graphique pour visualiser une crête particulière ou une zone plus en détail tant dans un spectre que dans un chromatogramme. L'utilisateur peut également effectuer un zoom avant à plusieurs reprises pour afficher les petites crêtes.

Graphiques

Les mêmes données peuvent être examinés de différentes manières. Les données peuvent également être conservées à des fins de comparaison avant l'exécution d'opérations comme le lissage ou la soustraction.

Une fenêtre contenant une ou plusieurs sous-fenêtres disposées de telle manière que tous les volets sont entièrement visibles et qu'ils ne se chevauchent pas.

Les volets peuvent être de taille variable ou fixe. Les volets sont automatiquement mis dans la fenêtre et sont disposés en colonnes et lignes. Si la taille de la fenêtre est modifiée, les volets dans la fenêtre change en taille pour s'adapter. Une fenêtre ne peut pas être plus petite que la taille minimum des volets.

Deux ou plusieurs fenêtres ou volets contenant des données semblables peuvent être reliés, par exemple, spectre avec des plages de masses similaires. Quand un volet ou une fenêtre est agrandi, l'autre volet aussi simultanément.

Par exemple, l'utilisateur peut relier un XIC au BPC d'où le XIC a été extrait. Agrandir le BPC agrandit également le XIC, ainsi les deux chromatogrammes affichent la même définition.

Tableau 6-8 Options de graphique

Pour ce faire ...	utiliser cette option de menu ...	... ou cliquer sur cette icône
Copier un graphique dans une nouvelle fenêtre	• Sélectionne le graphique à copier. Cliquez **sur Explore (Explorer) > Duplicate Data (Dupliquer des données)** > **Dans une nouvelle fenêtre**.	
Remet à l'échelle d'origine le graphique	• Sélectionner le graphique. Cliquer **sur Explore (Explorer) > Home Graph (Accueil Graphique)**.	

Tableau 6-8 Options de graphique (Suite)

Pour ce faire ...	utiliser cette option de menu ...	... ou cliquer sur cette icône
Déplacer un volet	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Move Panre (Déplacer volet)**. • Sélectionner le volet ou la fenêtre et puis faites-le glisser vers la nouvelle position. Cette position peut être dans la même fenêtre ou dans une autre fenêtre. Une flèche à quatre pointes est affichée lorsque le curseur est sur la limite de la fenêtre active ou le volet. • Si le volet est en haut ou en bas du volet cible, la fenêtre se déplace au-dessus ou au-dessous de ce volet, respectivement. • Si le volet est à droite ou à gauche du volet cible, la fenêtre se déplace à droite ou à gauche de ce volet, respectivement. • Si le volet est dans une autre position, le volet se déplace vers la ligne cible. L'ombre portée du volet quand il est déplacé indique sa nouvelle position.	
Lien volets	1. Avec deux graphes ouverts, cliquer sur l'un pour le rendre actif. 2. Cliquer sur**Explore (Explorer) > Link** puis cliquer sur l'autre volet.	
Supprimer le lien	• Fermer l'un des volets. Cliquer sur **Explore (Explorer) > remove Link (Supprimer le lien)**	
Supprimer un volet	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Delete Pane (Supprimer volet)**.	
Verrouiller un volet	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Lock Panes (Verrouiller volets)**.	
Masquer un volet	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Hide Pane (Masquer volet)**.	
Maximiser un volet	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Maximize Pane (Maximiser volet)**.	
organiser en mosaïque les volets	• Sélectionner le graphique. Cliquer sur **Window (Fenêtre) > Tile all Panes (Organiser en mosaïque tous les volets)** .	

Effectuer un zoom avant sur l'axe des y

1. Positionner le pointeur à gauche de l'axe des y, puis faites glisser verticalement depuis le point de départ.

   Une case est tracée le long de l'axe des y représentant la nouvelle échelle.

Remarque : Prenez garde lorsque vous effectuez un zoom avant sur la ligne de base. Zoom avant trop faible et le zoom dans la case disparaît.

2. Relâcher le bouton de la souris pour tracer le graphe à la nouvelle échelle.

Effectuer un zoom avant sur l'axe des x

1. Positionnez le pointeur sous l'axe des x d'un côté ou de l'autre de la zone à développer puis faites glisser depuis le point de départ en horizontal pour élargir la zone d'intérêt.
2. Relâcher le bouton de la souris pour retracer le graphe à la nouvelle échelle.

Conseil !Pour rendre au graphique son l'échelle d'origine, double-cliquer sur l'un des axes. Pour restaurer l'intégralité du graphique à l'échelle d'origine, cliquer sur **Explore (Explorer)** > **Home Graph (Accueil graphique)**.

Tableau 6-9 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre

Icône	Nom	Fonction
	Ouvrir le fichier	Ouvre les fichiers.
	Afficher échantillon Suivant	Va à l'échantillon suivant.
	Afficher échantillon précédent	Va à l'échantillon précédent.
	Aller à Échantillon	Ouvre la boite de dialogue Sélectionner un échantillon
	Données de la liste	Vues des données dans des tableaux.
	Afficher TIC	Génère un TIC à partir d'un spectre.
	Boite de dialogue Utilisation Extraction	Extrait des ions en sélectionnant les masses
	Afficher Chromatogramme de crêtes de base	Génère un 'BPC

Tableau 6-9 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Afficher le spectre	Génère un spectre à partir d'un TIC
	Copier un graphique dans une nouvelle fenêtre	Copie le graphique actif dans une nouvelle fenêtre
	Enlever la référence	Ouvre la boite de dialogue Enlever la référence
	Seuil	Ajuste le seuil
	Filtre pour le bruit	Cliquer sur la boite de dialogue Options de filtre auditif pour définir la largeur minimale d'une crête. Les signaux en dessous de cette largeur minimale sont considérés comme du bruit.
	Afficher ADC	Afficher données ADC
	Afficher le fichier Info	Affiche les conditions de l'expérience dans la collecte des données.
	Ajoutez des flèches	Ajoutez des flèches à l'axe des x du graphique actif.
	Enlever toutes les flèches	Enlever les flèches de l'axe des x du graphique actif.
	Décalage graphique	Cliquer pour compenser les légères différences pendant que les données du CAN et celles du spectromètre de masse soient enregistrées. Ceci est utile lors de la superposition des graphiques pour comparaison.
	Forcer pour les étiquettes des crêtes	Étiquette toutes les crêtes
	Dérouler Sélection par	Définit le facteur d'expansion pour une portion d'un graphique pour être affiché de manière plus détaillée.
	Effacer les plages	Remettre la sélection étendue à son affichage normal
	Définir la sélection	Cliquer pour taper les points de départs et de fin pour une sélection. Ce qui permet d'avoir une sélection aussi précise qu'il est possible d'obtenir en mettant en évidence la zone avec le curseur.

Tableau 6-9 Référence exploration rapide: chromatogrammes et spectre (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Normaliser à Max	Cliquer pour mettre à l'échelle un graphique au maximum et ainsi la crête la plus intense est en taille maximum, visible ou pas.
	Afficher l'historique	Afficher un résumé des opérations de traitement de données effectuées sur un fichier particulier, telles que le lissage, la soustraction, l'étalonnage et le filtrage du bruit.
	Ouvrir une base de données des composés	Ouvre la base de données des composés.
	Définir les seuils	Ajuste le seuil
	Afficher tracé de contour	Affiche les données sélectionnées soit en graphique spectral soit en XIC. En plus, pour les données acquises par DAD, un tracé peut afficher des données sélectionnées soit en spectre DAD soit en XWC.
	Afficher DAD TWC	Génère un TWC du DAD.
	Afficher DAD	Génère un DAD
	Extraire une longueur d'onde	L'utilisateur peut extraire jusqu'à trois plages de longueurs d'onde d'un spectre DAD pour afficher le XWC.

L'analyse et le traitement de données quantitatives 7

Utilisez les exemples de fichiers trouvés dans le dossier Exemple pour apprendre à sélectionner des échantillons pour une quantification, des requêtes préréglées et créer un tableau spécifique de celles-ci, comment analyser les données acquises. Pour plus d'informations sur les rubriques suivantes, reportez-vous au *guide de l'utilisateur expert*.

- Parcelles métriques
- Mise en page d'un tableau des résultats

Analyse quantitative

L'analyse quantitative est utilisée pour trouver la concentration d'une substance particulière dans un échantillon. En analysant un échantillon inconnu et en le comparant à d'autres échantillons contenant la même substance de concentrations connues (normes), le logiciel peut calculer la concentration de l'échantillon inconnu. Le processus implique la création d'une courbe d'étalonnage en utilisant les standards, puis en calculant la concentration de l'échantillon inconnu. Les concentrations calculées de chaque échantillon sont ensuite disponibles dans un tableau de résultats.

Méthodes de quantification

La méthode de quantification est un ensemble de paramètres utilisés pour générer les crêtes dans un échantillon. La méthode de quantification peut inclure des paramètres utilisés pour localiser et intégrer des crêtes, générer des courbes standards, et calculer les concentrations inconnues. Une méthode de quantification précédemment enregistrée peut être sélectionnée à partir du groupe du menu Quantification. Pour plus d'informations sur la création d'un groupe, reportez-vous à Créer et soumettre un lot à la page 64

L'utilisateur peut créer une méthode de quantification avant l'acquisition de données, puis appliquer la méthode à des données chiffrées automatiquement une fois le groupe terminé. Sinon, une méthode de quantification peut être créé et utilisée post-acquisition.

Trois outils peuvent être utilisés pour créer une méthode de quantification : Assistant Quantification, Créer un méthode de quantification et Quantification rapide.

Construire une méthode de quantification

Créer une méthode de quantification ne génère pas un tableau de résultats de quantification même si la méthode peut être utilisée par la suite dans la l'Assistant de Quantification pour créer un tableau. Créer une méthode de quantification peut aussi être utilisé pour modifier les méthodes quantification existantes. C'est la façon la plus souple de créer une méthode quantification.

Assistant de quantification

Avec l'assistant de quantification, un tableau de résultats est créé en même temps que la méthode de quantification Par ailleurs, la méthode de quantification existante peut être utilisée pour quantifier différents ensembles de données. C'est le moyen le plus courant utilisé pour créer une méthode quantification.

Quantification rapide

Quantification rapide fait partie du groupe Editor (Éditeur) Utilisez Quick Quant (Quantification rapide) pour ajouter des concentrations de composé avant l'acquisition de données. Quand un échantillon n'a pas été acquis, un échantillon représentatif ne peut pas être sélectionné ou aucune des crêtes vérifiée. Avec ce processus, seuls les composants de la méthode sont définis.

Sur les tableaux de résultats

Les tableaux de résultats résument la concentrations calculée d'une analyte dans chaque échantillon inconnu d'après la courbe d'étalonnage. Les tableaux de résultats comprennent également les courbes d'étalonnage ainsi que les statistiques des résultats. L'utilisateur peut personnaliser le tableau de résultats et en avoir la vision dans sa présentation.

Les données à partir d'un tableau de résultats peuvent être exportées vers un fichier .txt pour les utiliser dans d'autres applications comme Microsoft Excel. L'utilisateur peut également exporter les données dans le tableau ou dans les colonnes visibles.

Méthodes de quantification et tableaux de résultats

Pour les procédures suivantes, utiliser les données de l'échantillon installées avec le logiciel. Les données PK contiennent les groupe Mix_Batch1 et Mix_Batch2. Ces groupes d'échantillons sont utilisés pour démontrer l'utilité de ces parcelles métriques pour isoler échantillons difficiles. Les ions analysés ont été la réserpine (609,4 /195,0), le minoxidil (210,2 /164,2), le tolbutamide (271,3 /91.1) et la rescinnamine (635,4 /221,2), qui est la norme interne. Lot 1 ne contient aucune erreur en termes de préparation d'échantillon, tandis que Lot 2 contient un échantillon QC dans lequel la norme interne a été ajoutée deux fois (échantillon QC2).

Créer une méthode avec l'éditeur de méthode de quantification.

Conditions préalables :

- Sélectionner Exemple
- Utiliser un algorithme classique d'analyse

1. Dans la barre de navigation, sous **Quantitate (Quantité)**, double-cliquer sur **Buid Quantification Method (Construire une méthode d'acquisition)**.

   Une fenêtre sur la sélection de l'échantillon s'ouvre.
2. Dans les listes **Data Files (fichiers de données),** double-cliquer sur le **dossier** Triple Quad
3. Sélectionner **Mix_Batch_2. wiff** .

   Les échantillons dans le fichier de données sélectionné apparaissent dans la liste Échantillons.
4. Cliquer sur**OK**.
5. Dans les tableaux**Internal Standards (normes internes)**:
   i. Dans la colonne **Name (Nom)**, sélectionner rescinnamine.
   ii. Dans la colonne **Q1/Q3** sélectionner 635.400 /221.185 pour chaque norme.

Remarque : Si le champ d'identification du composé a été rempli pour les échantillons et les normes internes dans la méthode d'acquisition puis dans le tableau des normes internes, lorsqu'une valeur est sélectionnée dans le champ Q1/Q3 est sélectionné, le champ Nom est automatiquement renseigné.

6. Dans les tableaux **d'analyte**faire ce qui suit :
   i. Dans la colonne **Nom**, sélectionner réserpine
   ii. Dans la colonne **Normes Internes**, dans la liste, sélectionner celle qui sera associée à chaque analyte.
   iii. Dans la colonne **Q1/Q3** sélectionner 609.400 /195.039
   iv. Si nécessaire, ajouter un ou plusieurs des autres composés pour une analyse plus complexe.

Remarque : Si le champ d'identification du composé a été rempli pour les échantillons et les normes internes dans la méthode d'acquisition puis dans le tableau des analytes, le champ Nom et celui de Q1/Q3 sont automatiquement renseignés.

7. Cliquer sur **Intégration**.
8. En général, les paramètres d'intégration pré-définis sont adaptés à la plupart des pics. Si l'intégration n'est pas adapté, alors modifier l'algorithme.
9. Cliquer sur **Afficher ou Masquer les paramètres** pour afficher les algorithmes d'intégration.
10. Cliquer sur **Calibration**. Les paramètres prédéfinis sont adaptés à ces échantillons.
11. Enregistrer la méthode de quantification.

    La nouvelle méthode peut être utilisée à la création d'un groupe dans l'éditeur de groupe ou quand l'Assistant à la quantification est utilisé pour générer un tableau de résultats.

Remarque : La méthode de quantification ne peut être utilisée dans le projet en cours à moins qu'elle ne soit copiée vers un autre projet. Pour ce faire, cliquez sur Tools (Outils) **>Project (Projet > Copy Data (Copier données)**. Un nouveau projet doit être créé et sélectionné pour être disponible.

Créer un tableau de résultats en utilisant Assistant de quantification

Conditions préalables

- Sélectionner Exemple
- Utiliser un algorithme classique d'Analyst

1. Dans la barre de navigation, sous **Quantitate (Quantité)**, double-cliquer sur **Quantification Wizard (Assistant de quantification)**.

   La quantification créée, Sélectionner Samples (Échantillons) pour ouvrir les pages.

2. Dans les listes des fichiers **de données,** double-cliquer sur **le dossier** Triple Quad
3. Sélectionner **Mix_Batch_2.wiff** .
4. Cliquer sur **Add All Files (Ajouter tous les fichiers)** .
5. Cliquer sur **Next (Suivant)**.

   La quantification créée, Sélectionner Select Setting & Query (Paramètres et requêtes) pour ouvrir les pages.
6. Dans la **section** Default Query (Requête par défaut), cliquer sur **Select Existing (Sélection existante) : Query (requête)**.
7. Dans Requête**,** sélectionner **Accuracy (Précision) 15%** .
8. Cliquer sur **Next (Suivant)**.

Remarque : Pour créer une requête en même temps, reportez-vous à Créer une requête standard à la page 98

   La quantification créée, Sélectionner Méthode pour ouvrir les pages.
9. Cliquer sur Choos Existing Metyhod (Choisir **méthode existante)**.
10. Dans Méthode, sélectionner **PK Data_Mix.qmf**.
11. Cliquer sur **Terminer**.

    Le tableau de résultats s'ouvre.

Conseil !Pour ajouter ou enlever des échantillons dans le tableau de résultats, cliquer sur **Tools (Outils) > Results Table (Tableau de résultats) > Add/Remove Samples (Ajouter/Retirer échantillons)**.

12. Enregistrer le tableau de résultats.

Créer une requête standard

Une requête et une requête standard peuvent être créées de nombreuses façons. L'exemple suivant en est une. Pour plus d'informations sur la création de requêtes, reportez-vous à la rubrique Aide.

1. Dans la barre de navigation, sous **Quantitate (Quantité)**, double-cliquer sur **Quantification Wizard (Assistant de quantification)**.
2. La **quantification créée, ouvrir Select Samples (Sélectionner Échantillons),** sélectionner les échantillons.
3. Cliquer sur **Next (Suivant)**.
4. Dans la page **Select Settings & Query (Sélectionner Paramètres & Requêtes)**, dans la **Default Query (Requête par défaut)**, sélectionner **Create New Standard Query (Créer une nouvelle requête Standard)**.
5. Tapez un nom de requête.

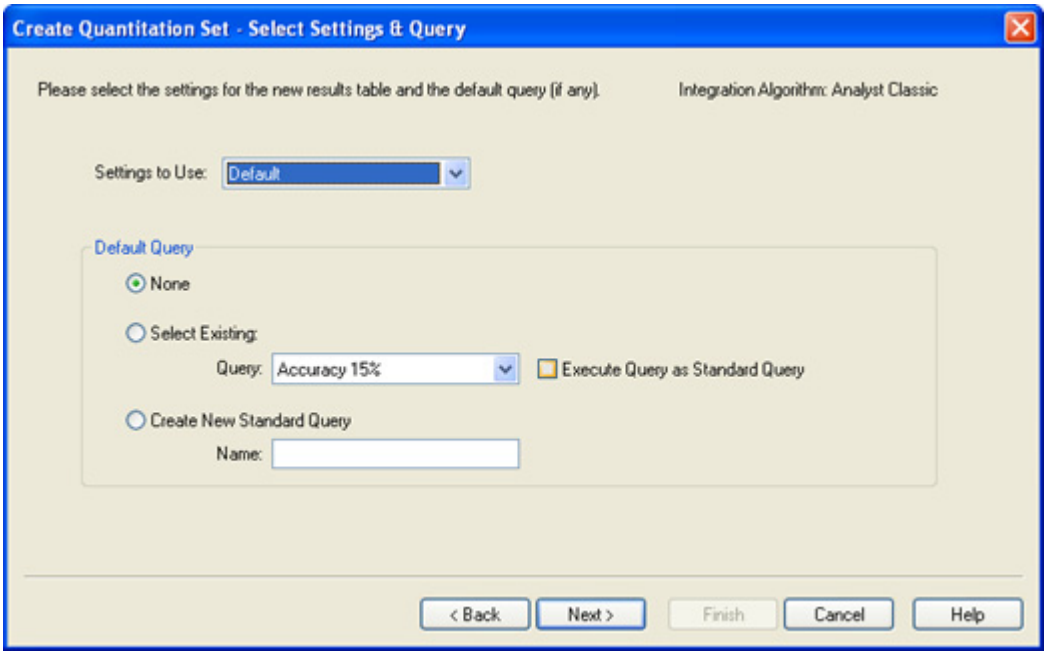


Figure 7-1 La quantification créée, Sélectionner Paramètres et requêtes pour ouvrir les pages.

6. Cliquer sur **Next (Suivant)**.

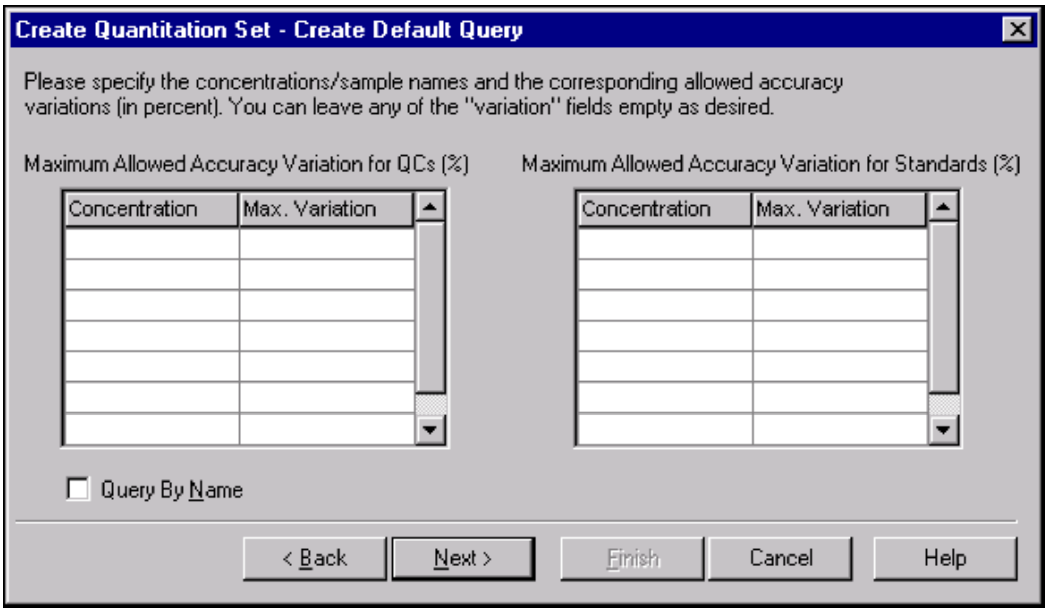

Create Quantitation Set - Create Default Query
Please specify the concentrations/sample names and the corresponding allowed accuracy variations (in percent). You can leave any of the "variation" fields empty as desired.
Maximum Allowed Accuracy Variation for QCs (%)
Concentration
Max. Variation
Maximum Allowed Accuracy Variation for Standards (%)
Concentration
Max. Variation
Query By Name
< Back
Next >
Finish
Cancel
Help

Figure 7-2 Créer un page Requête par défaut

7. Dans le tableau **Maximum Allowed Accuracy Variation for Qcs (%) (Variation maximum de précision autorisée pour QCs (%))** dans **Max. Variation** de colonne, saisissez le maximum possible de pourcentage de variations pour chaque QC (par exemple, 5 est ± 5%) sur la même ligne que la concentration correspondante. Si les concentrations n'étaient pas spécifiées au cours de l'acquisition, elles n'apparaissent pas ici. Dans ce cas, saisissez-les dans la colonne **Concentration**.

8. Dans le tableau **Variation maximum de précision autorisée pour Normes (%)** dans **Max. Variation** de colonne, saisissez le maximum possible de pourcentage de variations pour chaque norme (par exemple, 10 est ± 10%) sur la même ligne que la concentration correspondante. Si les concentrations n'étaient pas spécifiées au cours de l'acquisition, elles n'apparaissent pas ici. Dans ce cas, saisissez-les dans la colonne **Concentration**.
9. Cliquer sur **Next (Suivant)**.

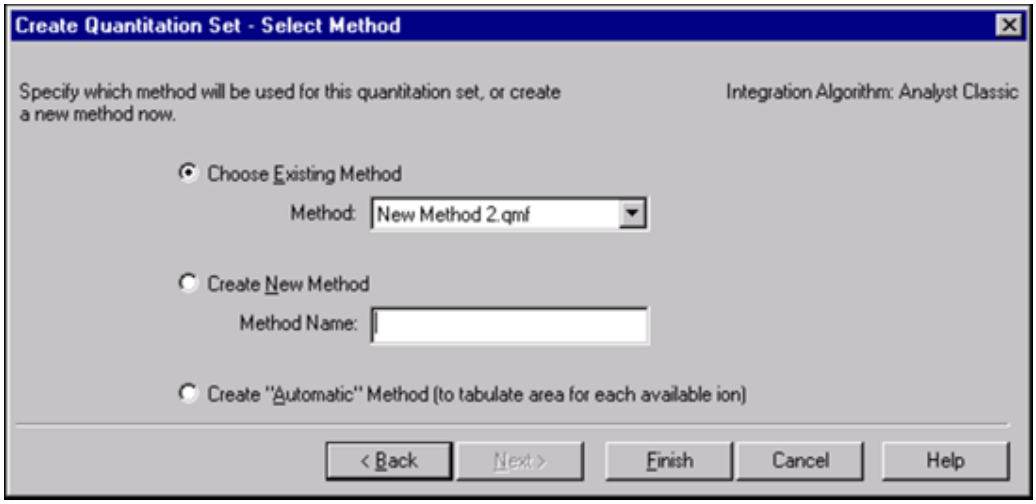

Create Quantitation Set - Select Method
Specify which method will be used for this quantitation set, or create a new method now.
Integration Algorithm: Analyst Classic
Choose Existing Method
Method: New Method 2.qmf
Create New Method
Method Name:
Create "Automatic" Method (to tabulate area for each available ion)
< Back
Next >
Finish
Cancel
Help

Figure 7-3 La quantification créée, Sélectionner Méthode pour ouvrir les pages.

10. Sélectionner ou créer une méthode.
11. Cliquer sur **Terminer**.

    La requête est utilisée comme une requête standard. Les résultats de la requête apparaissent comme une entrée réussie (Pass) ou en échec (Fail) dans le statut de la requête Standard de la colonne du tableau de résultats.

Conseil ! Pour retourner à la vue générale, cliquer avec le bouton droit de la souris, puis cliquer sur **Full**.

Menu en cliquant sur le bouton droit de la souris de Tableaux de résultats.

Cliquer avec le bouton droit dans le tableau de résultats pour accéder aux options suivantes.

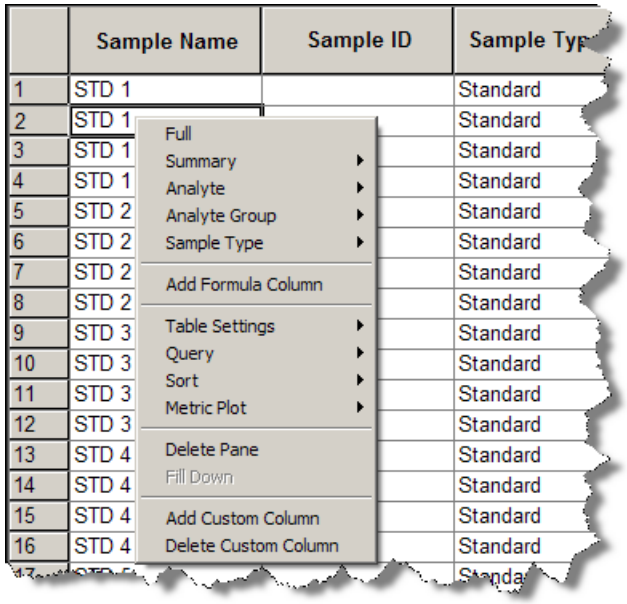


Figure 7-4 Menu en cliquant sur le bouton droit de la souris de Tableaux de résultats.

Menu	Fonction
Plein	Affiche toutes les colonnes.
Résumé	Affiche des colonnes spécifiques.
Analyte	Montre une analyte spécifique.
Groupe d'analyte	Créer un groupe d'analyte.
Type d'échantillon	Montre les échantillons d'un type spécifique ou tous les échantillons.
Ajouter colonne de formule	Ajoute une colonne formule.
Paramètres du tableau	Édite ou sélectionne les paramètres d'un tableau.
Requête	Crée ou sélectionne une requête.
Trier	Cliquez pour créer un tri simple ou par index.
Parcelles métriques	Crée une parcelle métrique
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre active.
Remplir vers le bas	Remplit les mêmes données dans les cellules sélectionnées.
Ajouter Colonne personnalisée	Ajoute une colonne personnalisée.
Supprimer Colonne personnalisée	Supprime la colonne personnalisée sélectionnée.

Réexamen des crêtes et intégration manuelle des crêtes

Utiliser Réexamen des crêtes pour étudier les pics que le logiciel a identifiés puis redéfinir la crête ou les points de début et de fin si nécessaire.

Après l'identification des analytes et des normes internes que le logiciel doit trouver, il recherche les crêtes dans les échantillons. Quand il identifie une crête, apparaissent les chromatogrammes pour chaque analyte et norme interne dans Créer Méthode de quantification: Définir intégration dans la page de l'Assistant Standard ou sur l'onglet Intégration de l'Éditeur complet de méthode. L'utilisateur peut confirmer les crêtes trouvées ou modifier la méthode de quantification, mieux les définir.

Examen des crêtes

Pendant l'examen des crêtes, l'utilisateur peut vouloir en afficher une dans son intégralité ou revoir le niveau de référence pour savoir comment le logiciel a bien trouvé les points de début et de fin de cette crête. Utiliser la fonction zoom automatique pour exécuter l'un ou l'autre.

Pour aider le logiciel à trouver une crête, définir ses points de début et de fin exacts et ceux de l'arrière-plan manuellement. Ces modifications s'appliquent uniquement à une crête à moins que la méthode globale n'ait été mise à jour.

Conseil !Pour réviser une crête individuelle, cliquer avec le bouton droit de la souris sur un point de la courbe, puis cliquer sur Afficher la crête. Le logiciel affichera la fenêtre Réexamen de crête avec celle sélectionnée.

1. Cliquer avec le bouton droit dans **Tableau de résultats**, cliquer sur **Analyte**.
2. Sélectionner un échantillon.
3. Cliquer sur Outils **> Examen de crête> Fenêtre**.

   Les crêtes apparaissent au-dessous du tableau de résultats avec seulement celles figurant dans le tableau de résultats.
4. Cliquer avec le bouton droit dans la fenêtre puis sur **Options**.
5. Dans **Options Examen des crêtes**, dans la section **Apparence**, changer **Num. lignes** à **1** et **Num. colonnes** à **2**.
6. Dans la section **Automatic Zooming (Zoom automatique)**, cliquer sur Zoom avant **axe Y à** : **100 % de la plus grande crête** pour faire apparaitre toute la crête.

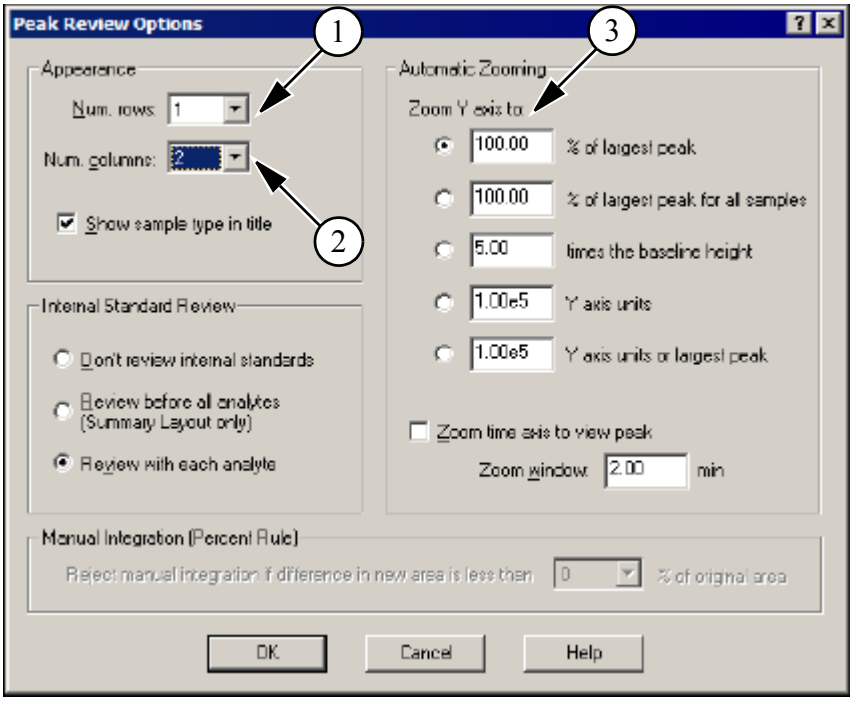

Peak Review Options
1
3
Appearance
Num. rows: 1
Num. columns: 2
Show sample type in title
2
Automatic Zooming
Zoom Y axis to:
100.00 % of largest peak
100.00 % of largest peak for all samples
5.00 times the baseline height
1.00e5 Y axis units
1.00e5 Y axis units or largest peak
Zoom time axis to view peak
Zoom window: 2.00 min
Internal Standard Review
Don't review internal standards
Review before all analytes (Summary Layout only)
Review with each analyte
Manual Integration (Percent Rule)
Reject manual integration if difference in new area is less than: 0 % of original area
OK
Cancel
Help

Figure 7-5 Boite de dialogue options Examen de crête

Article	Définition
1	Num. Lignes
2	Num. Colonnes
3	Faire un zoom sur l'axe Y à 100% des plus grandes crêtes.

7. Cliquer sur **OK**.
8. Pour se déplacer à travers les crêtes, cliquer sur la flèche droite. Reportez-vous à Figure 7-6 *Fenêtre Examen de crête* à la page 104.
9. Aller à la deuxième injection de norme 3.

   Dans cet exemple, la crête peut être intégrée plus près de la ligne de base en sélectionnant Paramètres spécifiques.

Conseil !Pour aller vers une crête spécifique dans le panneau Examen de crête, sélectionner la ligne correspondante dans le tableau de résultats.

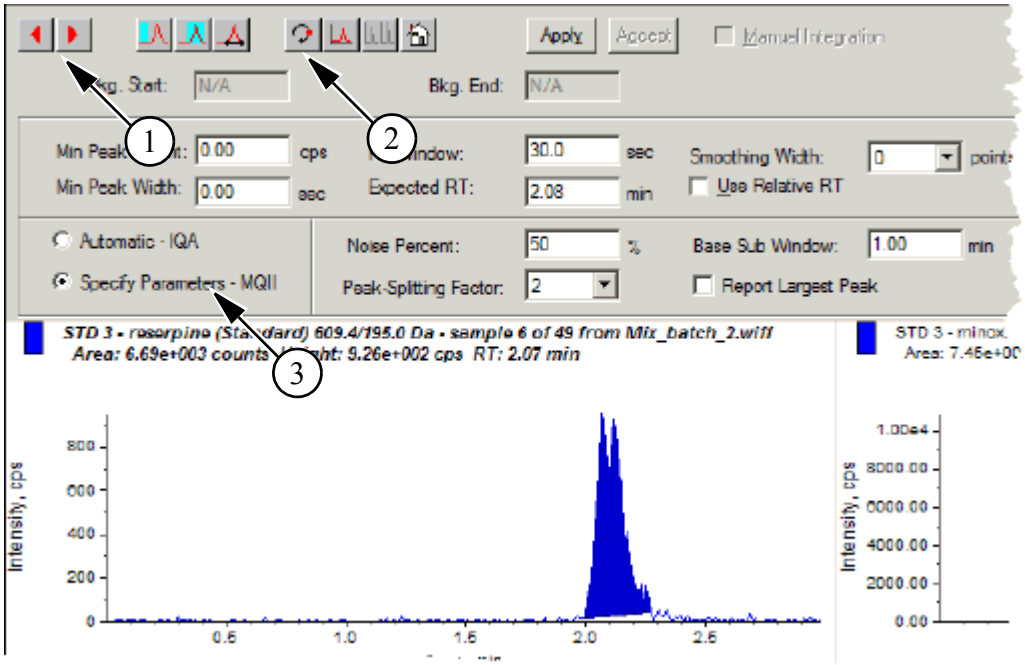


Figure 7-6 Fenêtre Examen de crête

Article	Description
1	Flèches : cliquer pour se déplacer à travers les crêtes.
2	Afficher ou masquer les paramètres : cliquer pour afficher les paramètres d'intégration.
3	Paramètres d'intégration : cliquer sur cette option pour modifier les paramètres.

10. Cliquer sur Afficher ou **masquer les paramètres** deux fois.
11. Cliquer sur **Définir les paramètres -MQ III**.
12. Modifier la valeur **Pourcentage de bruit**.
13. Cliquer sur **Apply (Appliquer)**.

    La crête est intégrée plus près de la ligne de base.
14. Si la modification n'améliore pas l'intégration des crêtes, alors régler **% de bruit** jusqu'à ce que la valeur optimale soit atteinte.
15. Pour mettre à jour l'algorithme pour toutes crêtes, cliquez avec le bouton droit sur la fenêtre puis cliquez sur **Mise à jour de la méthode**.

Remarque : La fonction Update Method (Mise à jour de la méthode) ne met à jour que les valeurs de l'algorithme pour cet analyte spécifique (ou norme interne).

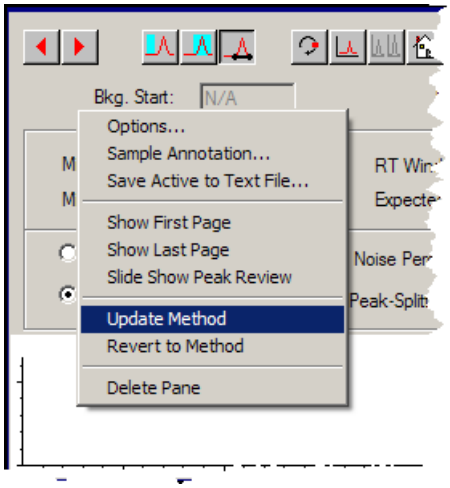


Figure 7-7 Méthode de mise à jour

Crêtes intégrées manuellement

L'intégration manuelle des crêtes doit être effectuée en dernier lieu. Intégrer manuellement les crêtes seulement si toutes n'ont pas été trouvées après le réglage et la mise à jour des paramètres de l'algorithme. Ceci est fait pour limiter la variabilité d'une personne à l'autre.

Remarque : Les crêtes intégrées manuellement, ou lorsque l'algorithme n'a été modifié que pour cette crête, sont identifiées comme telles dans la colonne Enregistrement modifié dans le tableau de résultats, comme les crêtes avec un paramètre d'algorithme changé pour un échantillon, mais non mis à jour pour tout le groupe d'analytes.

1. Dans **Peak review (Examen de crête),** cliquer sur **Manual Integration Mode (Mode d'intégration manuel)**.

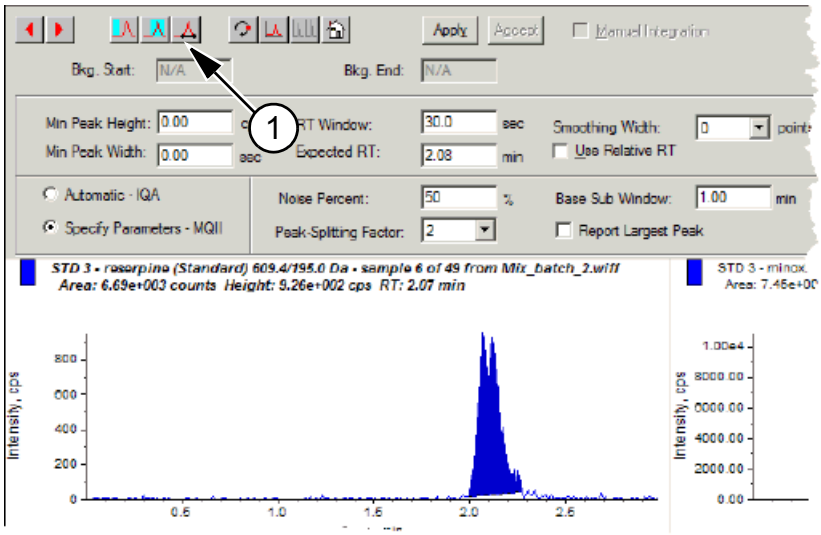


Figure 7-8 Fenêtre Examen de crête Intégration manuelle

Article	Description
1	Mode manuel d'intégration

2. Effectuer un zoom avant sur les 10% bas de la crête.

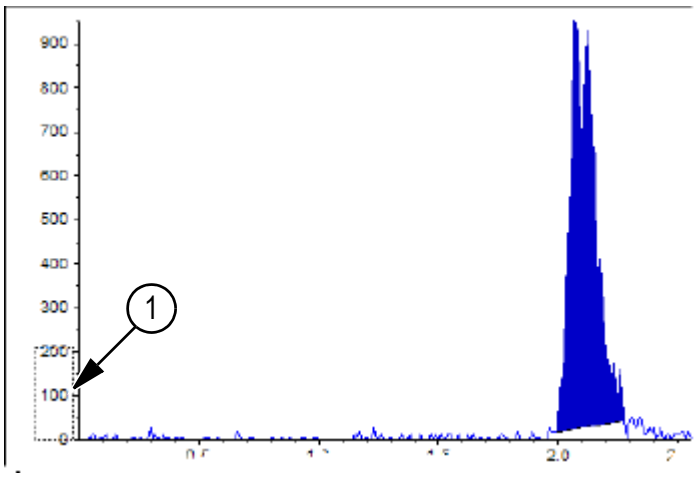


Figure 7-9 Fenêtre Examen de crête Effectuer un zoom avant sur une crête

Article	Description
1	10 % de la partie basse de la crête

3. Positionner la croix au début défini de la crête puis la faire glisser à la fin définie de cette crête.

   Le logiciel ombrage la zone délimitée à la base et côtés de la crête. Les paramètres de la crête sont gris quand ils ne sont plus applicables, car la crête a été dessinée manuellement.

4. Effectuer l'une des opérations suivantes :
   - Pour que ce changement soit définitif, cliquez sur **Accept (Accepter)**.
   - Pour annuler les modifications, effacer **Intégration manuelle** dans la fenêtre.

Conseil !Si une crête a été préalablement sélectionnée comme valide, cliquer avec le bouton droit de la souris sur la crête puis cliquer sur **revert to Method (Revenir à la méthode)**.

Menu bouton droit Examen de crête

Cliquer avec le bouton droit dans la fenêtre Examen de crête ou sur le volet pour accéder aux options suivantes.

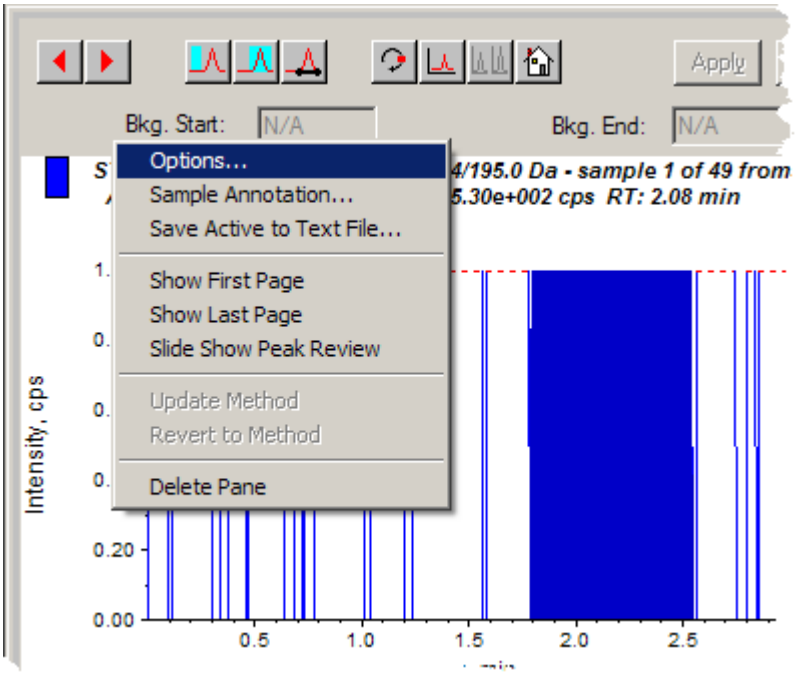


Figure 7-10 Menu bouton droit Examen de crête

Menu	Fonction
Options	Ouvre la boite de dialogue Options Examen de crête
Annotation échantillon	Ouvre la boite de dialogue Annotation échantillon
Enregistrer Actif dans un fichier texte	Enregistre la crête sélectionnée dans un fichier texte.
Affiche la première page	Va au premier échantillon.
Affiche la dernière page	Va au dernier échantillon.
Diaporama examen de crête	Ouvre le diaporama.
Méthode de mise à jour	Mises à jour de l'algorithme pour toutes les crêtes

Figure 7-10 Menu bouton droit Examen de crête (Suite)

Menu	Fonction
Revenir à la méthode	Cliquer pour avoir la nouvelle crête resélectionnée en se basant sur la méthode de quantification actuelle.
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre active.

Courbes d'étalonnage

Utiliser les courbes d'étalonnage pour trouver la concentration calculée d'échantillons, y compris les échantillons en CQ (contrôle qualité). Les échantillons CQ sont ajoutés à un groupe pour estimer la qualité des données et la précision des normes dans le lot. Les échantillons CQ sont connus comme concentrations d'analyte mais sont traités comme ne l'étant pas pour comparer les concentrations mesurées aux valeurs réelles.

La courbe d'étalonnage est générée par le tracé de la concentration de la norme par rapport à la superficie ou la hauteur. Si une norme interne est utilisé, le ratio de la concentration standard/ norme interne face au ratio de la hauteur de crête standard ou la surface sur la hauteur de la crête en norme interne ou la surface, est délimitée. La superficie ou la hauteur d'un échantillon est ensuite appliquée à cette courbe pour trouver la concentration de l'échantillon, comme indiqué dans le tableau de résultats. Une équation de régression est générée par cette courbe d'étalonnage en fonction de la régression qui a été spécifié. L'équation de régression est utilisée pour calculer la concentration des échantillons inconnus.

Affichage des courbes d'étalonnage

L'utilisateur peut afficher la courbe d'étalonnage et modifier les options de régression dans un tableau de résultats. Si il existe deux ou plusieurs tableaux de résultats ouverts, les courbes d'étalonnage peuvent être superposées. Pour superposer des courbes, la méthode utilisée pour créer les tableaux doit être la même.

Tracer la courbe d'étalonnage pour voir la courbe de régression. Le champ de la concentration calculée dans le tableau de résultats reflète les modifications résultant de l'ajustement de la courbe aux points de la norme.

Remarque : Cette option est disponible uniquement lorsque le tableau de résultats est ouvert dans l'espace de travail.

1. Avec un tableau de résultats ouvert, cliquer sur **Tools (Outils) > Calibration (Étalonnage) > Pane (volet)**.

   Le volet de la courbe d'étalonnage de la courbe d'étalonnage s'ouvre.

2. Si il y a plus d'un analyte, alors suivre les étapes suivantes pour afficher la courbe d'étalonnage pour un autre analyte:

i. Dans **Analyte,** sélectionner un analyte.
ii. Si besoin, dans la liste suivante, sélectionner **Area (Zone)**ou **Height (Hauteur)**.

3. Pour modifier les options de régression pour la courbe d'étalonnage, procéder de la manière suivante :
   i. Cliquez sur **Régression**.

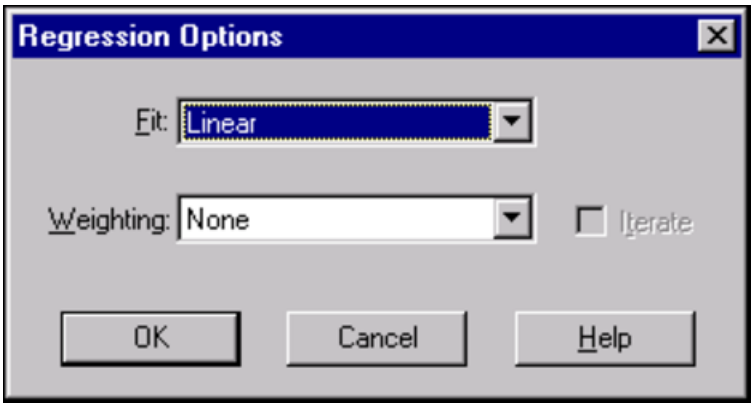


Figure 7-11 Boite de dialogue Options régression

   ii. Dans la **Fit**, sélectionner **Linéaire**.
   iii. Dans **Poids** sélectionner **1/x**.
   iv. Cliquer sur **OK**.

   La courbe d'étalonnage s'ouvre. L'utilisateur peut consulter les crêtes individuellement sur la courbe ou exclure des points de la courbe pour obtenir une meilleure courbe.

4. Si nécessaire, répéter ces étapes pour créer une courbe plus appropriée.
5. Pour enregistrer les modifications, cliquer sur **Accepter**.

Courbes d'étalonnage superposées

Remarque : Pour examiner la courbe pour un tableau plus attentivement, cliquer avec le bouton droit de la souris sur la courbe et sur Tracé Actif. Sélectionner la courbe à tracer par dessus.

1. Avec deux ou plusieurs tableaux de résultats ouverts, affiche une courbe d'étalonnage pour chacun des tableaux.
2. Cliquer avec le bouton droit sur la courbe d'étalonnage et cliquer sur **Superposition**.

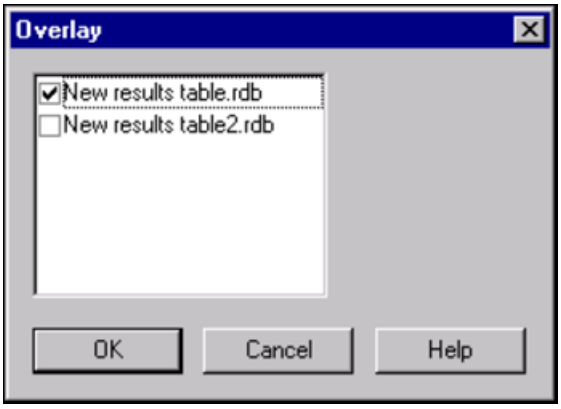


Figure 7-12 Boite de dialogue Superposition

3. Sélectionner les tableaux à superposer avec la courbe actuelle.
4. Cliquer sur **OK**.

   Le logiciel trace les courbes de tous les tableaux sélectionnés sur le même graphique.

Menu Cliquer sur Courbe d'étalonnage

Cliquer avec le bouton droit sur la fenêtre Calibration pour accéder aux options suivantes.

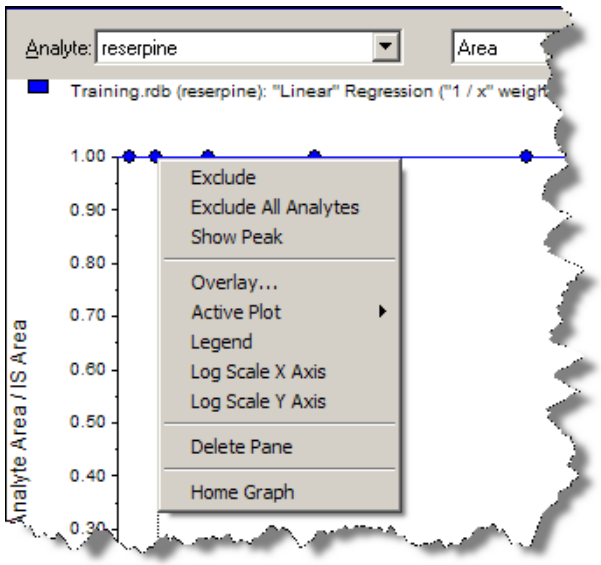


Figure 7-13 Menu Cliquer sur Courbe d'étalonnage

Menu	Fonction
Exclure (Inclure)	Cliquer avec le bouton droit sur le point et cliquer sur **Exclure** pour exclure le point de la courbe. Cliquer avec le bouton droit sur **Inclure** l'inclure.

Figure 7-13 Menu Cliquer sur Courbe d'étalonnage (Suite)

Menu	Fonction
Exclure tous les analytes (inclure tous les analytes)	Cliquer avec le bouton droit sur **Exclure tous les analytes** pour exclure tous les analytes de la courbe. Cliquer avec le bouton droit sur **Inclure tous les analytes** pour les inclure.
Afficher Crête	Cliquer ici pour consulter une crête individuelle.
Superposition	Superpositions de deux graphiques.
Tracé actif	Détermine quel tracé est actif.
Légende	Affiche la légende du graphique.
Échelle logarithmique Abscisse X *	Cliquer sur ce bouton pour utiliser une échelle logarithmique sur l'abscisse X
Échelle logarithmique Ordonnée Y	Cliquer sur ce bouton pour utiliser une échelle logarithmique sur l'ordonnée Y
Supprimer fenêtre	Supprime la fenêtre active.
Graphique Accueil	Remet à l'échelle d'origine le graphique
*** Une échelle logarithmique organise les points de données en présentation plus pratique pour que l'effet de tous les points puissent être contrôlés simultanément. Pour cet affichage, sélectionner Échelle Log Ordonnée Y face à Échelle Log X et pas uniquement sur un seul axe.**	

Statistique d'échantillon

Utilisez la fenêtre Statistiques pour afficher les statistiques des échantillons, généralement pour les normes et les CQ (contrôles qualité). Les données de chaque lot disponible dans le tableau de résultats s'ouvrent sous la forme d'un tableau dans la grille et une ligne de données est affichée pour chaque concentration standard ou CQ.

Afficher les statistiques pour normes et CQ

Lors de l'affichage de plus d'un tableau de résultats, des informations statistiques sur les normes et les CQ de lots additionnels dans la fenêtre des statistiques, peuvent être obtenues. Ceci permet à l'utilisateur de comparer les résultats entre les lots et d'observer les tendances dans les normes ou les CQ.

1. Avec un tableau de résultats ouvert, cliquer sur **Outils > Statistiques**.
2. Dans **Statistics Metric (Statistique en système métrique)**, sélectionner **Concentration**.
3. Dans le champ**Analyte Name (Nom Analyte),** sélectionner un analyte.
4. Dans **Sample Type (Type d'échantillons),** sélectionner **Standard (Norme)**.

   Les résultats s'affichent.
5. Regardez les colonnes **%CV** et **Accuracy (Précision)**.

Le %CV indique le coefficient de variance entre les mesures d'un seul paramètre, par exemple la surface. Précision montre combien près le point du tracé est de la valeur désirée.

6. Si nécessaire, sélectionner Display Low/High Values (Affichage **valeurs Haute/ Basse** , puis examiner la valeur **basse**, **haute**, et **moyenne** pour chaque ligne de la grille. Chaque ligne représente les normes qui ont le même niveau de concentration.
7. Sélectionner un autre analyte.

   Les résultats s'affichent par-analyte.
8. Pour vérifier les variations de CQ à un même niveau de concentration, sélectionner **CQ** dans **Type d'échantillon**.

Comparer les résultats entre les lots

Le chiffre des analytes et leur noms doivent être le même pour les données à travailler dans le volet des statistiques.

1. Ouvrir les tableaux de résultats.
2. Cliquer sur **Tools (Outils) > Statistics (Statistiques**).
3. Effectuer l'une des opérations suivantes :
   - Pour organiser les résultats par tableau de résultats, dans **Conc. Comme pour les lignes**, sélectionner **Group by Batch (Grouper par lot)**.
   - Pour organiser les résultats par ordre de concentration, dans **Conc. Comme pour les lignes**, sélectionner **Group by Concentration (Grouper par concentration)**.
   - Pour organiser les résultats par ordre de concentration, mais sans une ligne indiquant les statistiques pour chaque groupe ou par lots, dans **Conc. Comme pour les lignes**, sélectionner **Grouper par concentration (pas toutes)**.

   Le logiciel trie les résultats. À la fin de chaque lot ou groupe, une ou deux lignes supplémentaires apparaissent : Tout (statistiques de tous les tableaux de résultats dans ce groupe) et Moyenne (statistiques pour ce lot ou groupe).

Tableau 7-1 Onglet de l'icône de l'assistant Intégration et Quantification

Icône	Nom	Fonction
	Définir les paramètres à partir de Zone Contexte	Utiliser la crête sélectionnée.
	Selectionner Peak (Crête)	Utiliser le contexte sélectionné
	Mode manuel d'intégration	Cliquer pour intégrer manuellement les crêtes.
	Afficher ou masquer les paramètres	Cliquer pour basculer entre les paramètres trouvés de la crête, affichés et masqués

Tableau 7-1 Onglet de l'icône de l'assistant Intégration et Quantification (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Afficher graphique actif	Affiche le chromatogramme de l'analyte uniquement.
	Affiche l'analyte et IS	Affiche l'analyte et son chromatogramme (disponible uniquement lorsque une norme interne associée existe).
	Utilisation de la vue par défaut pour le graphique	Retourne vers la vue prédéfinie (afficher toutes les données) (si, par exemple, l'utilisateur a effectué un zoom sur un chromatogramme).

Tableau 7-2 Icônes de tableaux de résultats

Icône	Nom	Fonction
	Trier dans l'ordre croissant par sélection	Cliquer pour trier la colonne sélectionnée par ordre croissant des valeurs.
	Trier dans l'ordre décroissant par sélection	Trier la colonne sélectionnée par ordre décroissant des valeurs.
	Verrouillage ou déverrouillage colonne	Verrouille ou déverrouille la colonne sélectionnée. Une colonne verrouillée ne peut pas être déplacé.
	Tracé métrique par sélection	Crée un tracé métrique à partir de la colonne sélectionnée.
	Afficher tous les échantillons	Affiche tous les échantillons dans le tableau de résultats.
	Supprimer Colonne de formule	Supprime la colonne de formule

Tableau 7-3 Icône Référence rapide : Mode Quantitatif

Icône	Nom	Fonction
	Ajouter/Retirer des échantillons	Ajoute ou supprime des échantillons provenant du tableau de résultats.
	Exporter sous forme de texte	Enregistre les tableaux de résultats dans un fichier texte.
	Méthode de modification	Cliquer pour ouvrir un .fichier wiff
	Examen de crête, Volet	Ouvre les crêtes dans un volet.
	Examen de crête, Fenêtre	Ouvre les crêtes dans une fenêtre

Tableau 7-3 Icône Référence rapide : Mode Quantitatif (Suite)

Icône	Nom	Fonction
	Étalonnage Volet	Ouvre la courbe d'étalonnage dans un volet.
	Étalonnage Fenêtre	Ouvre la courbe d'étalonnage dans une fenêtre.
	Affiche la première crête	Montre la première crête dans le volet ou la fenêtre.
	Affiche la dernière crête	Montre la dernière crête dans le volet ou la fenêtre.
	Afficher Journal d'audit	Affiche le journal d'audit du tableau de résultats.
	Libérer Journal d'audit	Libère le journal d'audit du tableau de résultats.
	Statistiques	Ouvre la fenêtre des statistiques.
	Générateur de rapports	Ouvre le logiciel pour les rapports.

Instrumentation Série 6500 Exigences et paramètres

A

Cette annexe comprend les besoins électriques et en gaz et les paramètres des instruments de l'instrumentation série 6500.

Exigences électriques et en gaz

Le tableau suivant contient les valeurs de tension nominale d'entrée, les fluctuations de tension en entrée, la fréquence, le courant d'entrée maximum et la puissance maximale entrée, le cas échéant.

Tableau A-1 Exigences d'alimentation électrique

Composant	Valeurs
Instrument	200 à 240 V, ± 10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 10 A, 1000 V
Pompe primaire (Leybold)	200 À 240 V, ± 10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 4,2 A (50 Hz), 4,7 A (60 Hz), 2420 V (50 Hz), 2250 (60 Hz)
Pompe primaire (Varian)	200 à 240 V, ± 10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 1,76 A, 1200 V
Banc d'instrumentation	100 à 240 V, ± 10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 1 A, 240 V
Ordinateur	115 à 230 V, ± 10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 6/3 A, 690 V
Écran	100 à 240 V, ± -10% de la valeur nominale, 50/60 Hz, 1,5 A, 360 V

Le tableau suivant contient les besoins en gaz pour l'instrumentation série 6500.

Tableau A-2 Besoins en gaz

Gaz	Description	Exigences
Gaz 1/Gaz 2	Air zéro	Air zéro à 100 psi (max.); débit de 22l/min.
Alimentation Curtain Gas™; gaz CAD	Azote UHP (ultra haute pureté) (N2)	N2 UHP à 60 psi (max.); débit de 10 l/min.
Évacuation	Air domestique, air zéro, ou N2 UHP	Air domestique, air zéro, ou N2 UHP à 55 psi; débit de 8 l/min. Ne pas faire fonctionner en dessous 55 psi.

Paramètres de l'instrumentation

Le tableau suivant contient les paramètres génériques pour la série 6500. Le premier nombre de chaque type d'analyse est la valeur prédéfinie; la plage de numéros est accessible pour chaque paramètre.

Tableau A-3 Paramètres pour série 6500

CODE D'ACCÈS	Mode Ion positif			Mode Ion négatif		
	Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CUR ([6]	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55
CUR([1][2][3][4][5][7][8]	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55	20 10 à 55
CAD[a][b]	0 Fixe	6 Fixe	Moyen Bas, Moyen, Haut	0 Fixe	6 Fixe	Moyen Bas, Moyen, Haut
CAD[c][d]	0 Fixe	6 Fixe	6 0 à 12	0 Fixe	6 Fixe	6 0 à 12
([1][2][7]	5500 0 à 5500	5500 0 à 5500	5500 0 à 5500	-4500 -4500 à 0	-4500 -4500 à 0	-4500 -4500 à 0
IS[5] Tension pour le transfert d'ions	1500 0 à 2500	1500 0 à 2500	1500 0 à 2500	-1500 -2500 à 0	-1500 -2500 à 0	-1500 -2500 à 0
IS[6]	1000 0 à 4000	1000 0 à 4000	1000 0 à 4000	-1000 -4000 à 0	-1000 -4000 à 0	-1000 -4000 à 0
NC([3][4][8]	3 0 à 5	3 0 à 5	3 0 à 5	-3 -5 à 0	-3 -5 à 0	-3 -5 à 0
TEM[2][3][4][5][7][8]	0 0 à 750	0 0 à 750	0 0 à 750	0 0 à 750	0 0 à 750	0 0 à 750
DP	100 0 à 300	100 0 à 300	100 0 à 300	-100 -300 à 0	-100 -300 à 0	-100 -300 à 0
EP	10 2 à 15	10 2 à 15	10 2 à 15	-10 -15 à -2	-10 -15 à -2	-10 -15 à -2
CEM	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300
GS1	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90	20 0 à 90

(1)IonSpray™ source d'ions (2)TurboIonSpray® source d'ions (3)nébuliseur chauffé (4)DuoSpray™ source d'ions, 1 =TIS et 2 =HN (5)PhotoSpray® source d'ions (6) Nanospray® source d'ions (7)IonDrive™ Turbo V source d'ions (8) Nébuliseur chauffé IonDrive Turbo V source (a) AB SCIEX QTRAP® Système 6500 LM (faible masse) (b) AB SCIEX QTRAP Système 6500 HM (masse élevée) (c) AB SCIEX Triple Quad™ Système 6500 LM (d) AB SCIEX Triple Quad système 6500 HM

Tableau A-3 Paramètres pour série 6500 (Suite)

CODE D'ACCÈS	Mode Ion positif			Mode Ion négatif		
	Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
GS2	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90	0 0 à 90
IHT [6]	150 0 à 250	150 0 à 250	150 0 à 250	150 0 à 250	150 0 à 250	150 0 à 250
sdp[4]	1 1 ou 2	1 1 ou 2	1 1 ou 2	1 1 ou 2	1 1 ou 2	1 1 ou 2
EX2	0 Fixe	0 Fixe	0 Fixe	0 Fixe	0 Fixe	0 Fixe
IQ1 (IQ1 = Q0 + ajustement)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + (-0.5)	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5	Q0 + 0.5
ST1 (ST1 = Q0 + ajustement)	Q0 + (-10)	Q0 + (-10)	Q0 + (-10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10
IE1 (IE1 = Q0 - RO1)	1,0 0 à 3	N/a	1 0 à 3	-1 -3 à 0	N/a	-1 -5 à 0
IQ2 (IQ2 = Q0 + ajustement)	Q0 + (-10)	Q0 + (-10)	Q0 + (-10)	Q0 + 10	Q0 + 10	Q0 + 10
RO1	N/a	Q0 + (-1)	N/a	N/a	Q0 + 1	N/a
RO2	-20 Fixe	-20 Fixe	N/a	20 Fixe	20 Fixe	N/a
CE (CE = Q0 - RO2)	N/a	N/a	30 5 à 180	N/a	N/a	-30 -180 à -5
ST3 (ST3 = RO2 + ajustement)	RO2 + (-10)	N/a	N/a	RO2 + (10)	N/a	N/a

(1)IonSpray™ source d'ions (2)TurboIonSpray® source d'ions (3)nébuliseur chauffé (4)DuoSpray™ source d'ions, 1 =TIS et 2 =HN (5)PhotoSpray® source d'ions (6) Nanospray® source d'ions (7)IonDrive™ Turbo V source d'ions (8) Nébuliseur chauffé IonDrive Turbo V source (a) AB SCIEX QTRAP® Système 6500 LM (faible masse) (b) AB SCIEX QTRAP Système 6500 HM (masse élevée) (c) AB SCIEX Triple Quad™ Système 6500 LM (d) AB SCIEX Triple Quad système 6500 HM

Tableau A-3 Paramètres pour série 6500 (Suite)

CODE D'ACCÈS	Mode Ion positif			Mode Ion négatif		
	Q1	Q3	MS/MS	Q1	Q3	MS/MS
CXP (CXP = RO2 - ST3)	N/a	15 0 à 55	15 0 à 55	N/a	-15 -55 à 0	-15 -55 à 0
RO3	-50 Fixe	N/a	N/a	50 Fixe	N/a	N/a
IE3	N/a	2 0 à 5	2 0 à 5	N/a	-2 -5 à 0	-2 -5 à 0

(1)IonSpray™ source d'ions (2)TurboIonSpray® source d'ions (3)nébuliseur chauffé (4)DuoSpray™ source d'ions, 1 =TIS et 2 =HN (5)PhotoSpray® source d'ions (6) Nanospray® source d'ions (7)IonDrive™ Turbo V source d'ions (8) Nébuliseur chauffé IonDrive Turbo V source (a) AB SCIEX QTRAP® Système 6500 LM (faible masse) (b) AB SCIEX QTRAP Système 6500 HM (masse élevée) (c) AB SCIEX Triple Quad™ Système 6500 LM (d) AB SCIEX Triple Quad système 6500 HM

Tableau A-4 Paramètres des systèmes QTRAP 6500 HM (masse élevée) et LM (faible masse) pour scan type LIT seulement

CODE D'ACCÈS	Mode Ion positif	Mode Ion négatif
CUR (6)	20 10 à 55	20 10 à 55
CUR(1)(2)(3)(4)(5)(7)(8)	20 10 à 55	20 10 à 55
CAD	Haut Bas, Moyen, Haut	Haut Bas, Moyen, Haut
(1)(2)(7)	5500 0 à 5500	-4500 -4500 à 0
IS(5)	1500 0 à 2500	-1500 -2500 à 0
IS(6)	1000 0 à 4000	-1000 -4000 à 0
NC(3)(4)(8)	3 0 à 5	-3 -5 à 0
TEM(2)(3)(4)(5)(7)(8)	0 0 à 750	0 0 à 750
DP	100 0 à 300	-100 -300 à 0

Tableau A-4 Paramètres des systèmes QTRAP 6500 HM (masse élevée) et LM (faible masse) pour scan type LIT seulement (Suite)

CODE D'ACCÈS	Mode Ion positif	Mode Ion négatif
EP	10 2 à 15	-10 -15 à -2
AF2	0,100 0 ou 1	0,100 0 ou 1
AF3	Dépendant -de la vitesse de la masse 0 à 10	Dépendant -de la vitesse de la masse 0 à 10
EXB	Dépendant -de la vitesse de la masse -165 à 0	Dépendant -de la vitesse de la masse 0 à 165
CEM	1150 0 à 3300	1150 0 à 3300
GS1	20 0 à 90	20 0 à 90
GS2	0 0 à 90	0 0 à 90
EC	0 0 à 50	0 0 à 50
IE1	1 0 à 5	-1 -5 à 0
CE (Q0 - ROS)	10 5 à 180	-10 -180 à -10
IHT [6]	150 0 à 250	150 0 à 250
sdp[4]	1 1 ou 2	1 1 ou 2

(1)IonSpray™ source d'ions (2)TurboIonSpray® source d'ions (3)nébuliseur chauffé (4)DuoSpray™ source d'ions, 1 =TIS et 2 =HN (5)PhotoSpray® source d'ions (6) Nanospray® source d'ions (7)IonDrive™ Turbo V source d'ions (8) Nébuliseur chauffé IonDrive Turbo V source

Tableau B-1 Fréquence de réglage

	Calibrage		Optimisation de la résolution	
Type d'analyse	**Fréquence**	**Manuel/ Automatique**	**Fréquence**	**Manuel/Automatique**
Q1 et Q3	3 à 6 mois	Les deux	3 à 6 mois	Les deux
LIT	Toutes les 2 semaines; comme requis	Les deux	3 à 6 mois	Automatisé uniquement

Tableau B-2 Solutions suggérées de réglage pour le système AB SCIEX Quad™ 6500.

Système	Positif	Négatif
Système AB SCIEX QTRAP® 6500 (Faible Masse et masse élevée)	2×10^{-7} M PPG (1:500)	3×10^{-5} NEG PPG (1:10)

Tableau B-3 Solutions suggérées de réglages pour le système QTRAP® 6500

	Q1 et Q3		LIT
Instrument	**Positif**	**Négatif**	**Positif et négatif**
Système QTRAP 6500 (faible masse et masse élevée)	2×10^{-7} M PPG (1:500)	3×10^{-5} NEG PPG (1:10)	1:100 mélange Agilent

Tableau B-4 Scanneur à ions positifs Q1 et Q3 PPG et PPG3000 pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (faible masse)

Solution	Masses								
PPG	59,05	68,1	99,1	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883
PPG3000	60,05	74	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	-

Tableau B-5 Scanneur à ions négatifs Q1 et Q3 PPG et PPG3000 pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (faible masse)

Solution	Masses					
PPG	44,998	91	249	585,385	933,636	1223,845
PPG3000	44,998	44,998	91	585,385	933,636	1223,845

Tableau B-6 Scanneur à ions positifs Q1 et Q3 PPG et PPG3000 pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (masse élevée)

Solution	Masses											
PPG	59,05	68,1	99,1	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	1254,925	1545,134	1951,427
PPG3000	60,05	74	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	-	-	-	-

Tableau B-7 Scanneur à ions négatifs Q1 et Q3 PPG et PPG3000 pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (masse élevée)

Solution	Masses							
PPG	44,998	91	249	585,385	933,636	1223,845	-	-
PPG3000	44,998	44,998	91	585,385	933,636	1223,845	1572,097	1862,306

Tableau B-8 Scanneur à ions positifs Q1, Q3 PPG, PPG3000 et Agilent pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (faible masse)

Solution	Masses								
PPG	59,05	68,1	99,1	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883
PPG3000	60,05	74	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	-
Agilent	118,087	322,049	622,029	922,01	-	-	-	-	-

Tableau B-9 Scanneur à ions négatifs Q1, Q3 PPG, PPG3000 et Agilent pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (faible masse)

Solution	Masses					
PPG	44,998	91	249	585,385	933,636	1223,845
PPG3000	44,998	44,998	91	585,385	933,636	1223,845
Agilent	112,985	431,982	601,978	-	-	-

Tableau B-10 Scanneur à ions positifs Q1, Q3 PPG, PPG3000 et Agilent pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (masse élevée)

Solution	Masses											
PPG	59,05	68,1	99,1	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	1254,925	1545,134	1951,427
PPG3000	60,05	74	175,133	500,38	616,464	906,673	1080,799	1196,883	-	-	-	-

Tableau B-10 Scanneur à ions positifs Q1, Q3 PPG, PPG3000 et Agilent pour système (Suite) AB SCIEX Triple Quad 6500 (masse élevée)

Solution	Masses											
Agilent	118,087	322,049	622,029	922,01	1521,972	-	-	-	-	-	-	-

Tableau B-11 Scanneur à ions négatifs Q1, Q3 PPG, PPG3000 et Agilent pour système AB SCIEX Triple Quad 6500 (masse élevée)

Solution	Masses							
PPG	44,998	91	249	585,385	933,636	1223,845	-	-
PPG3000	44,998	44,998	91	585,385	933,636	1223,845	1572,097	1862,306
Agilent	112,987	431,982	601,978	1033,988	1633,949	-	-	-

Nettoyage et entretien

C

Nettoyer régulièrement et entretenir le système pour garder des performances optimales. Pour plus d'informations sur la fréquence des réglages, reportez-vous à Tableau B-1 *Fréquence de réglage* à la page 121.

Le tableau suivant fournit un programme recommandé pour le nettoyage et la maintenance du système. Contactez un technicien qualifié de maintenance pour commander les consommables.

Tableau C-1 Tâches de maintenance du système

Composant	Fréquence	Tâche	Pour plus d'informations, reportez-vous à la section ...
Plaque rideau	Selon besoin	Nettoyer	Nettoyer la plaque rideau.
Plaque à trou	Selon besoin	Nettoyer	Nettoyer l'avant de la plaque à trou
Guide d'ions QJet®	Selon besoin	Nettoyer	Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX
Lentille Q0 et IQ1	Selon besoin	Nettoyer	Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX
Instrumentation filtre à air	Tous les 6 mois	Inspecter et nettoyer ou remplacer	*Guide du chargé d'entretien*
Surfaces de l'instrumentation	Selon besoin	Nettoyer	Nettoyage de surface
Bouteille de vidange	Selon besoin	Vide	Vider la bouteille de trop plein
Huile de pompe primaire	Varian MS 40 : Chaque année	Remplacer	Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX
Électrode	Selon besoin	Inspecter et nettoyer ou remplacer	Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX
Aiguille de décharge par effet corona	Selon besoin	Remplacer	Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX

Pour les tâches "selon besoin", suivez ces directives :

- Nettoyer la plaque rideau du guide d'ions QJet et la zone Q0 si la sensibilité du système baisse.
- Nettoyer les surface du spectromètre de masse après un déversement ou si elle sont sales.
- Videz la bouteille de vidange lorsqu'elle est pleine.

Contactez un représentant d'AB SCIEX pour toute aide sur la maintenance.

Précautions en matière de santé et de sécurité

- Déterminer quels sont les produits chimiques qui peuvent avoir été utilisés dans le spectromètre de masse avant sa mise en service. Reportez-vous aux fiches techniques de sécurité pour les précautions d'hygiène et de sécurité qui doivent être suivies avec les produits chimiques.
- Travailler dans un endroit bien aéré.
- Porter une équipement de protection individuelle attribué, y compris des gants sans poudre, en nitrile, des lunettes de sécurité, et une blouse de laboratoire.
- Suivre les usages des travaux en électricité en sécurité.
- Éviter les sources d'étincelles lors de l'utilisation de matériaux inflammables, comme l'isopropanol, méthanol, et autres solvants inflammables.
- Prendre toute précaution avec l'utilisation et l'élimination des produits chimiques. Risque potentiel de blessure grave si les procédures adéquates de traitement et d'élimination des matières dangereuses ne sont pas suivies.
- Éviter tout contact de la peau avec des produits chimiques pendant le nettoyage, et se laver les mains après utilisation.
- Se conformer à toutes les réglementations locales pour la gestion des déchets biologiques dangereux, toxiques ou radioactifs.

AVERTISSEMENT !Risques de radiation, biologiques ou de toxicité chimique potentiels : Déterminer si la décontamination de l'instrumentation est nécessaire avant de procéder au nettoyage. La décontamination doit être effectuée avant tout nettoyage si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec l'un des instruments.

Attention: Dommage potentiel sur l'équipement : Rincer l'acide-contenant des solvants de nettoyage avec de l'eau. Ne pas utiliser de solvants chlorés, ces produits peuvent endommager les composants du guide d'ions QJet.

Nettoyage de surface

Nettoyer les surfaces externes du spectromètre de masse après un déversement ou si elles sont sales.

- Essuyer les surfaces extérieures avec un chiffon doux humidifié à l'eau tiède et savonneuse.

Vider la bouteille de trop plein

Videz la bouteille de vidange lorsqu'elle est pleine.

AVERTISSEMENT !Matériaux biologiquement dangereux : Dépôt de matériel biologiquement dangereux dans des conteneurs étiquetés correctement. Risque potentiel de blessure grave si les procédures adéquates de traitement et d'élimination des matières biologiquement dangereuses ne sont pas suivies.

1. Désactivation du système.
2. Dévisser le bouchon de la bouteille de trop plein.

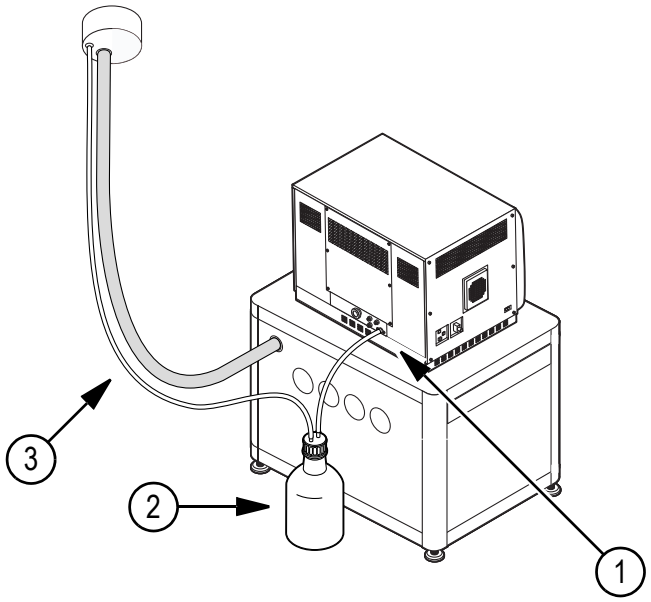


Figure C-1 Bouteille de vidangeDrain

Article	Description
1	Connexion au spectromètre de masse.
2	Bouteille de vidange (bouteille de vidange comme indiquée à l'arrière du spectromètre de masse, afficher les points de connexion. Le trop-plein est situé sur le côté du spectromètre de masse lorsqu'il est installé).
3	Connexion à la ventilation.

3. Se débarrasser des déchets.
4. Vissez la bouteille sur le couvercle.

Nettoyage frontaux

Nettoyer l'avant du spectromètre de masse de manière classique, pour :

- Minimiser les temps d'arrêt du système.

- Maintenir une sensibilité optimale.
- Éviter un nettoyage plus important lors des visites d'entretien.

Symptômes de contamination : importante perte de sensibilité et une augmentation du bruit de fond.

Lors d'une contamination, effectuer un premier nettoyage de routine. Nettoyer jusqu'à et y compris l'avant de la plaque à trou. Si le nettoyage ne résout pas les problèmes de sensibilité, un nettoyage complet peut être nécessaire.

Cette section fournit des instructions du nettoyage de routine sans interrompre la dépression et du nettoyage complet sous atmosphère, après ventilation du spectromètre de masse.

Remarque : Suivre les réglementations locales applicables. Pour la santé et les consignes de sécurité, reportez-vous à Précautions en matière de santé et de sécurité pour plus d'informations.

Remarque : Pour des informations et des demandes de commande de consommables, appeler 877-740-2129 (pour les ÉTATS-UNIS uniquement), ou aller sur www.absciex.com.

Nécessite des outils et du matériel

- Gants sans poudre (nitrile recommandé)
- Lunettes de sécurité
- Blouse de laboratoire
- Une eau fraiche de grande qualité (minimum eau dé-ionisée 18 Mohm (DI) ou eau ultra-pure type HPLC). De l'eau ancienne peut contenir des éléments susceptibles de contaminer le spectromètre de masse.
- Méthanol, isopropanol (2-propanol) ou acétonitrile de qualité HPLC ou LCMS
- Solution de nettoyage. Utilisez l'une des options suivantes :
  - 100% de méthanol
  - 100 % d'isopropanol
  - Solution à 50:50 d'acétonitrile et d'eau (préparation au jour le jour)
  - Solution à 50:50 d'acétonitrile et d'eau avec 0,1 % d'acide acétique (préparation au jour le jour)

Attention: Ne pas utiliser de solvants chlorés.

Tableau C-2 Outils et fournitures disponibles chez AB SCIEX

Description	PN
Petite tige en polyester (thermoliés)	1017396
Petit chiffon sans peluche (11 cm x 21 cm); disponible dans l'ensemble des consommables	WC018027

Meilleures pratiques

AVERTISSEMENT !Risques de radiation, biologiques ou de toxicité chimique potentiels : Déterminer si une contamination est nécessaire avant de procéder au nettoyage. La décontamination doit être effectuée avant tout nettoyage si des matières radioactives, des agents biologiques ou des produits chimiques toxiques ont été utilisés avec l'un des instruments.

- Toujours porter des gants sans poudre, pour les procédures de nettoyage.
- Après le nettoyage des composants du spectromètre de masse et avant de les remonter, enfiler une paire de gants propres.
- Ne pas utiliser les produits de nettoyage autres que ceux spécifiés dans cette procédure.
- Préparer les solutions de nettoyage juste avant le début de la procédure, si possible.
- Préparer et stocker toutes les solutions organiques et celles contenant de l'organique dans du verre très propre uniquement. Ne jamais utiliser de bouteilles en plastique. Les contaminants peuvent s'infiltrer dans ces bouteilles et contaminer après le spectromètre de masse.
- Ne mettre que la partie centrale du chiffon au contact de la surface de l'instrument. Le bords de coupe peuvent perdre des fibres.

Conseil !Envelopper le chiffon autour de la tige en polyester thermoliée.

Figure C-2 Exemple : Plier le chiffon

- Ne mettre en contact la tige et la surface qu'une seule fois, la jeter après utilisation pour évier toute contamination
- Les plus grandes pièces de l'interface de dépression comme la plaque rideau, peuvent nécessiter plusieurs nettoyages, utiliser plusieurs lingettes.
- Pour éviter de contaminer la solution, verser la solution sur la lingette ou une tige.
- Imbibez le chiffon ou la tige lors d'utilisation d'eau ou de solution de nettoyage. L'eau, en plus des solvants organiques, peut désagréger la lingette en laissant des résidu sur le spectromètre de masse.

Préparation pour un nettoyage

Dans un nettoyage de routine, nettoyer la plaque rideau et l'avant de la plaque à trou. Un nettoyage de routine peut être effectué alors que le spectromètre de masse reste en dépression.

Remarque : Les spectromètres de masse avec une source d'ions Nanospray® peut nécessiter un nettoyage complet pour obtenir de meilleurs résultats. Contactez un technicien (FSE) AB SCIEX

1. Désactiver le profil matériel.

AVERTISSEMENT !Risque sur surface chaude : Les surfaces de la source d'ions IonDrive™ Turbo V chauffent pendant leur fonctionnement. Laisser la source d'ions refroidir pendant au moins 90 minutes avant de commencer les procédures de maintenance.

2. Enlever la source d'ions. Veillez à placer la source d'ions dans un endroit sûr.
3. Attendre au moins 90 minutes pour la plaque rideau et celle à trou pour refroidir.
4. Couvrir la drain de la source avec la plaque-couvercle (si disponible), ou un couvercle similaire.

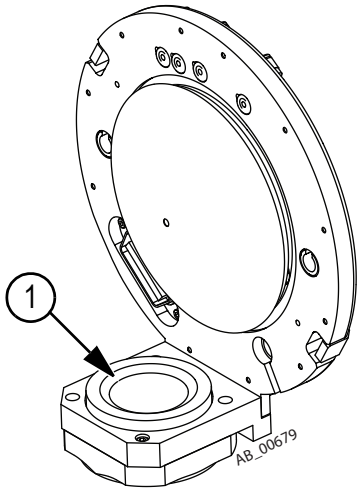


Figure C-3 Drain de la source sur l'interface du vide.

Article	Description
1	Drain de la source

Nettoyer la plaque rideau.

1. Déposer la plaque rideau, puis placez-la sur une surface propre et stable.

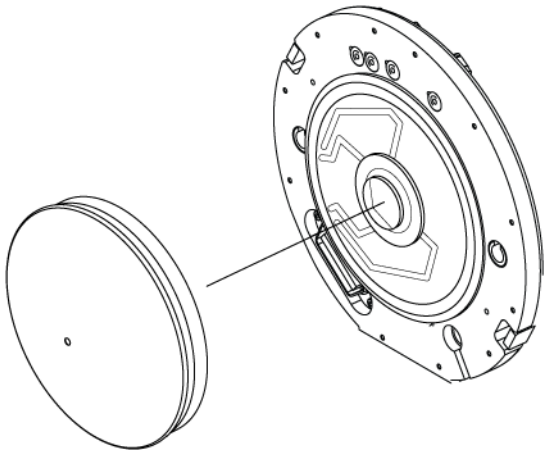


Figure C-4 Interface avec la plaque rideau retirée

2. En utilisant des lingettes et de l'eau, nettoyer les deux côtés de la plaque rideau.
3. Répéter cette opération en utilisant étape 2 la solution de nettoyage.
4. Utiliser un chiffon humidifié ou une petite tige, nettoyez l'ouverture.
5. Attendre le séchage de la plaque rideau.
6. Inspecter la plaque rideau qu'elle soit exempte de taches de solvant ou de peluches, éliminer les résidus avec un chiffon propre, légèrement humide et sans peluche.

Remarque : Les taches ou films persistants indiquent la présence d'un solvant contaminé.

Nettoyer l'avant de la plaque à trou

Remarque : Si la plaque à trou standard a un chauffage d'interface amovible, ne pas déposer l'élément chauffant pendant le nettoyage.

1. Lors d'un nettoyage de la plaque à trou d'un Nanospray, enlever le chauffage de l'interface et le nettoyer :
   i. Essuyer le chauffage avec un chiffon sans peluche humidifié à l'eau.
   ii. Essuyer le chauffage avec un chiffon sans peluche avec de la solution de nettoyage.
2. Humidifier le chiffon sans peluche avec de l'eau puis essuyer l'avant de la plaque à trou.

Attention: Dommage potentiel sur l'équipement : Ne pas introduire un câble ou une brosse métallique dans l'orifice, pour éviter d'endommager l'ouverture.

3. Répéter cette opération en utilisant étape 2 la solution de nettoyage.

4. Attendre le séchage de la plaque à trou.
5. Inspecter la plaque à trou qu'elle soit exempte de taches de solvant ou de peluches, éliminer les résidus avec un chiffon propre, légèrement humide et sans peluche.

Remarque : Les taches ou films persistants indiquent la présence d'un solvant contaminé.

Remettre le système en service

1. Installer la plaque rideau sur l'extrémité avant du spectromètre de masse.
2. Retirer la protection du drain de la source d'ions.
3. Installer la source d'ions sur le spectromètre de masse. Se référer au guide de fonctionnement *de la source d'ions*.
4. Serrer la source d'ions en tournant ses loquets de verrouillage vers le bas, en position tête en bas.
5. Activer le profil matériel.

Dépannage système de base

D

Cette annexe contient des informations de base pour le dépannage de problèmes basiques sur le système. Certaines activités peuvent être menées par la personne qualifiée et formée d'AB SCIEX chargée de la maintenance dans le laboratoire. Pour un dépannage plus important, contactez un FSE d'AB SCIEX .

Tableau D-1 Problèmes sur le système

Problème	Cause Possible	Action corrective
Perte de sensibilité	L'instrumentation ou la source d'ions nécessite un réglage et une optimisation	Pour plus d'informations, reportez-vous à : • Réglage de l'instrument et de l'étalonnage • *Guide opérant de la source d'ions IonDrive™ Turbo V Ion* • Système d'aide du Logiciel d'analyse®
	Plaque rideau sale	Reportez-vous Nettoyer la plaque rideau.pour plus d'informations.
	Plaque à trou sale	Reportez-vous Nettoyer l'avant de la plaque à troupour plus d'informations.
	Guide d'ions QJet intel®, Q0 ou IQ0 sale	Contactez un FSE d'AB SCIEX ou votre chargé local de la maintenance formé par AB SCIEX.
Contaminations fréquentes ou fortes du guide d'ions QJet	Le débit du Curtain Gas™ est trop bas	Vérifier et, le cas échéant, augmenter le débit du gaz de rideau.
Pression basse de l'aspiration	Niveau bas de l'huile de la pompe primaire	Vérifier le niveau d'huile de la pompe primaire et en rajouter si nécessaire. Contactez un FSE d'AB SCIEX ou votre chargé local de la maintenance formé par AB SCIEX.

Pour les ventes, une assistance technique ou de maintenance, contacter un FSE d'AB SCIEX ou visitez le site de AB SCIEX www.absciex.com pour obtenir les informations pour un contact.